



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH

Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE MÀSTER

Màster en Enginyeria Química

VALIDACIÓ DEL SIMULADOR FLACS PER ANÀLISIS DE RISC PER DOLLS DE FOC D'HIDROCARBURS



Memòria – Annex

Autor: Josep Galí Labarias
Director: Elsa Pastor
Departament CERTEC
Co-Director: Borja Rengel
Convocatòria: Mes de juny de 2017

SUMARI

Els dolls de foc són fenòmens de tipus tèrmic, que tenen lloc, principalment a la indústria, i es consideren accidents greus. La principal problemàtica del fenomen resideix en l'efecte domino que poden provocar. Els dolls de foc es defineixen com una ignició d'una fuga continua de gasos o vapors inflamables continguts en conduccions o contenidors amb sobrepressió.

Els efectes adversos dels incendis en la indústria química solen limitar-se a una àrea més petita que en el cas d'explosions i emissions tòxiques. No obstant, l'àrea afectada sovint conté altres equips que poden ser seriosament danyats pel flux tèrmic i la incidència de la flama, creant un efecte dòmino, la qual cosa porta a un accident major. Entre els principals accidents de foc, els incendis de dolls són els més importants, ja que en repetides ocasions han estat reportats com la primera etapa en accidents greus amb explosions, incendis grans, i danys severos als equips pròxims a causa de la radiació tèrmica i la incidència de la flama.

Els simuladors CFD (*Computational Fluid Dynamics*) són una eina molt útil per modelitzar possibles incendis (i accidents de tota mena) en la vida real. Els incendis de petita escala, es poden reproduir de manera experimental per tal d'estudiar el seu comportament, però l'experimentació en incendis de gran escala comporta una gran dificultat i esforç econòmic. Les simulacions resulten altament útils per poder estudiar els diferents escenaris, evitar possibles danys al medi ambient i disminuir un impacte innecessari.

El present treball pretén reproduir incendis de dolls d'hidrocarburs a partir del simulador FLACS-Fire (versió v10.5). Les simulacions s'han basat en els experiments de dolls de foc que van ser realitzats per el CERTEC a través de la tesi doctoral de Mercedes Gómez [1].

En el [capítol 1](#) s'explica la importància de l'estudi de dolls de foc degut a la rellevància que aquests poden tenir en l' indústria. A més, es detalla la rellevància a nivell global dels simuladors anomenats *Computational Fluid Dynamics* (CFD), i la seva eficàcia a l'hora de predir possibles efectes d'accidents de tot tipus. Seguidament, es presenta el simulador FLACS i les seves peculiaritats que el diferencien. Per tancar el capítol, es postulen les bases teòriques de dinàmica d'incendis. S'inicia amb la més representativa, la combustió. Aquesta és altament important per tal d'entendre el comportament del foc i les diferències que es poden generar depenent dels combustibles utilitzats i l'estat dels mateixos. A continuació, s'expliquen els tres fenòmens que intervenen en la transferència de calor: la conducció, la convecció i la radiació. El següent fenomen comentat és la turbulència, aquesta és altament rellevant en el comportament del foc, tenint un efecte directe en el rendiment de la reacció de combustió degut a l'augment de mescla que pot provocar entre combustible i comburent. Posteriorment, el model de sutge és presentat amb totes les seves possibilitats, amb una àmplia explicació teòrica de la formació d'incandescents.

A continuació, en el [capítol 2](#), s'inclou una breu descripció i exposició dels objectius per tal d'entendre les diferents etapes que s'han hagut de realitzar en aquest treball.

En el [capítol 3](#) es presenten els diferents antecedents de treballs amb simuladors CFD que s'han portat a terme en els últims temps. S'explica detalladament la importància i la consistència de cada treball, per tal d'entendre la rellevància que poden tenir en aquest estudi. Un dels antecedents és Pedersen [2], que també va simular incendis de dolls a partir d'experiments realitzats al CERTEC per Palacios [3]. Pedersen, d'altra banda, va realitzar simulacions d'incendis de bassals i de dolls de foc amb dos combustibles diferents, propà i etilè.

En el [capítol 4](#) es resumeixen els resultats de dues tesis sobre dolls de focs que es van realitzar en el CERTEC. Destaca la tesi de Gómez [1], ja que les simulacions realitzades en el present treball han estat enfocades a poder comparar els resultats obtinguts amb els resultats mesurats per Gómez Mares. L'autora, fa important menció a la diferència dels resultats quan els combustibles es troben en estat gasós o en mescla bifàsica. També és destacable la problemàtica que Gómez Mares va trobar a l'hora de definir l'altura de la flama degut al fenomen del "*lift-off*".

En el [capítol 5](#), una àmplia explicació sobre els models més importants del simulador FLACS són explicats. El simulador FLACS, dona la possibilitat d'implementar diferents models de combustió, aquests són descrits i explicats detalladament en el capítol. Destaca el mòdul *eddy dissipation concept* (EDC) per incendis amb flama turbulenta, i el mòdul MIB per incendis amb flama poc turbulenta. Seguidament, el model de radiació és comentat àmpliament, degut a la controvèrsia que aquest comporta amb el seu càlcul en simuladors CFD. Diversos autors van publicar respecte la dificultat que aquest comportava i també la seva rellevància en els incendis de doll. Els models estudiats van ser el "DTM" i el "Six-flux". Per continuar, s'estudia el model de sutge, la seva presència dona una radiació major a la flama i un color característic al fum procedent del incendi. D'igual manera que en els models anteriors, el model de formació de sutge també ha plantejat controvèrsia entre els diferents autors, ja que la formació del mateix és rellevant per determinar les característiques de cada tipus d'incendi. Per tancar el capítol 5, s'expliquen els dos models que el simulador FLACS implementa per simular els dolls, aquests es diferencien quan la velocitat de sortida és subsònica i quan és sònica.

Finalment, en el [capítol 6](#), els resultats de les simulacions són exposats per tal de conèixer les dificultats de simular el fenomen de doll de foc amb FLACS-Fire, i les recomanacions que es donen en cada cas. Primerament, s'explica detalladament les assumpcions que s'han pres per tal de realitzar els experiments (cabal, malla, submodels de FLACS, variables d'interès, etc.). A continuació, se simulen i s'analitzen en detall tres proves experimentals. L'estudi de cada experiment es compon per un anàlisi qualitativa (mitjançant gràfiques) i una anàlisi quantitativa (mitjançant els índexs estadístics FB i NMSE). Els resultats de les dues anàlisis donen a entendre que el simulador planteja dues casuístiques en els seus resultats: l'aproximació al fenomen regeix en les zones de la flama més allunyades del fenomen "*lift-off*" (per sensors de temperatura) i en les zones més allunyades de l'eix de la flama (per sensors de radiació). D'altra banda, es plantegen dos escenaris diferents: simulacions amb model de formació de sutge (model FOX) i sense model de sutge. Les primeres tendeixen a aproximar millor els resultats de temperatura, i les segones de radiació. Per concloure, és important destacar que el simulador aproxima (generalment) millor els resultats de temperatura (error $\pm 40\%$) en vers als resultats de radiació (error $\pm 70\%$).

ÍNDIX

SUMARI	IV
ÍNDIX	VI
1. INTRODUCCIÓ	1
1.1. Dolls de foc i riscos associats	1
1.2. Estadístiques sobre l'ocurrència de doll de foc.....	2
1.3. Paràmetres importants en el fenomen dels dolls de foc	2
1.4. Introducció als simuladors CFD	3
1.5. Introducció al simulador FLACS.....	4
1.6. Fonaments teòrics	5
1.6.1. Fonaments teòrics de la combustió	5
1.6.2. Mecanismes de transferència de calor	6
1.6.3. Fonaments teòrics de la turbulència.....	7
1.6.4. Fonaments teòrics del sutge	8
2. OBJETIUS	9
3. ANTECEDENTS DE SIMULACIONS EN CFD	10
3.1. Tesi doctoral “ <i>CFD Study of Gas Dispersion and Jet Fires Incomplex Geometries</i> ”.....	10
3.2. Tesi mestral “ <i>An Experimental Study of Pool Fires and Validation of Different CFD Fire Models</i> ”	12
3.3. Tesi “ <i>Modeling of jet and pool fires and validation of the fire model in the CFD code FLACS</i> ”.....	12
3.4. Conclusions dels autors estudiats.....	13
4. EXPERIMENTS DEL CERTEC	15
4.1. Tesi doctoral “ <i>Estudio experimental y modelización matemática de dardos de fuego</i> ” ...	15
4.2. Tesi doctoral “ <i>Study of Jet Fires Geometry and Radiative Features</i> ”	21
5. SIMULADOR FLACS-FIRE	25
5.1. Model de combustió en FLACS	25
5.2. Model de radiació en FLACS	26
5.3. Model de turbulència en FLACS	28
5.4. Model de sutge en FLACS.....	28
5.5. Model de doll en FLACS	29
5.5.1. Model de doll per velocitats subsòniques	29
5.5.2. Model de doll per velocitats sòniques.....	29

6. SIMULACIÓ DELS EXPERIMENTS DE DOLLS DE FOC DEL CERTEC AMB FLACS-FIRE	32
6.1. Assumpcions prèvies	32
6.2. Anàlisi exploratòria.....	35
6.2.1. Malla	35
6.2.2. Cabal	41
6.2.3. Combustió	43
6.2.5. Radiació	44
6.2.3. Sutge	46
6.2.4. Conclusions de l'anàlisi exploratòria.....	48
6.3. Simulació de l'experiment JFP-006-08	49
6.4. Simulació de l'experiment JFP-006-03	55
6.5. Simulació de l'experiment JFP-005-03	59
7. CONCLUSIONS	63
8. REFERÈNCIES	65
9. ANNEX.....	67

1. INTRODUCCIÓ

Els accidents a la indústria química sempre han estat relacionats amb la casuística del foc, les explosions o les dispersions atmosfèriques de materials perillosos. Els incidents poden ocórrer per un dels fenòmens mencionats o per la combinació d'alguns d'ells, per exemple, un foc pot desencadenar l'explosió d'un dipòsit, una explosió pot provocar una dispersió de núvol tòxic, etc. Els accidents poden involucrar a les persones, les propietats i el medi ambient.

Mitjançant les dades històriques, es pot saber que en les últimes dècades els accidents han augmentat degut al desenvolupament de les indústries de procés i de manufactura. Pel que fa als incendis, aquests es poden classificar en 4 tipus diferents: incendi de basal, doll de foc, “*flash-fire*” i boles de foc. La generació de cada un d'ells depèn de les condicions prèvies a l'accident, per exemple, el confinament o no del producte, l'estat, les condicions de la fuita de producte i les condicions atmosfèriques.

1.1. Dolls de foc i riscos associats

Els dolls de foc són fenòmens de tipus tèrmic, que tenen lloc principalment a la indústria, i que es consideren accidents greus. Més concretament, es defineixen com una ignició d'una fuita continua de gasos o vapors inflamables continguts en conduccions o contenidors amb sobrepressió (Figura 1). Els dolls de foc són generats a partir d'una combustió de flama de difusió ([1.6.1. Fonaments teòrics de la combustió](#)) i generalment, tenen una alta turbulència implicada ([1.6.3. Fonaments teòrics de la turbulència](#)). La seva principal problemàtica no resideix tant en la radiació generada ([1.6.2. Fonaments teòrics de la radiació](#)), ja que aquesta acostuma a ser menor que la d'altres fenòmens tèrmics, com en el fet que, en cas d'incidir en altre equipament de la planta pot provocar l'efecte dominó.



Figura 1: Experiment de doll de foc. [4]

1.2. Estadístiques sobre l'ocurrència de doll de foc

Els dolls de foc són els incendis amb més freqüència en la indústria i en el transport de materials perillosos. Tanmateix, les bases de dades no representen els dolls de foc com els més importants, degut al fet que aquestes no especifiquen el tipus de foc o que quan ho fan, no els tenen en compte. En altres paraules, quan els dolls de foc tenen un radi d'acció petit, aquests no queden reflectits en cap estudi, en canvi, els altres tipus d'accidents (incendis de basal, boles de foc i incendis de flash) sí que es registren degut al seu efecte més imponent.

Des de el 1961 s'han identificat 84 accidents (a nivell global) que involucraven dolls de foc. D'aquests accidents, el 25% van ocórrer en la dècada dels 70, posteriorment, el nombre d'accidents va disminuir fins al 8% (posterior dècada dels 80). Des de la dècada dels 80, el nombre d'accidents s'ha mantingut força constant, aproximadament el 45% dels casos correspon en els passats 25 anys, i l'altre 30% en els passats 15 anys. [5]

1.3. Paràmetres importants en el fenomen dels dolls de foc

Per estudiar de forma detallada i adequada els dolls de foc, és necessari conèixer els paràmetres i termes involucrats en el fenomen.

L'altura de la flama i la zona de no-ignició ("*lift-off*" en nomenclatura anglosaxona), són dos aspectes a tenir en compte. Degut a la turbulència implicada en les flames, normalment s'usen valors mitjans per poder treballar amb més facilitat.

Hi ha una forta controvèrsia en la definició de l'altura de la flama, alguns autors la defineixen com l'altura des de la sortida del flux de combustible fins la zona visible de la flama. Altres, consideren que la manera més adequada és definir-la com la distància des de la zona visible de la flama fins la seva punta, al llarg de la línia central del doll. També existeix una altra altura de flama, l'altura de la flama química. Aquesta es calcula a partir de les concentracions dels productes (alguns utilitzen la conversió del combustible al 99% i altres les concentracions de diòxid i monòxid de carboni). [5]

La zona de no-ignició (ZNI o "*lift-off*") és definida com la distància de la sortida del combustible del doll de foc i la zona visible de la flama. La ZNI és influenciada per paràmetres com la velocitat de sortida del combustible, el vent, etc. El fenomen es produeix degut a les proporcions de d'oxigen (comburent) i hidrocarbur (combustible) que es donen a la sortida del doll; si les proporcions estan per sota els límits d'inflamabilitat la combustió no es donarà, i en conseqüència, no hi haurà flama. A partir de la zona de no ignició, la combustió s'estableix en un estat estacionari que contribuiria a la continua producció de productes fins exhaurir el combustible. Per tal de mantenir la flama, és necessari que s'arribi a un equilibri entre la velocitat del gas i la velocitat de desplaçament de la flama ("*lift-off*").

La condició d'extinció o apagat ("*blowout*") és també un paràmetre a conèixer en l'estudi dels dolls de foc. Aquest es presenta quan la ZNI és tan gran que acaba per apagar la flama, això es dona quan la configuració geomètrica de la flama és pertorbada per les condicions de velocitat de sortida del hidrocarbur. En altres paraules, el "*blowout*" apareix quan es supera el límit marcat per la velocitat de sortida que desestabilitza la configuració geomètrica de la flama, i en

conseqüència, disminueix la mínima relació combustible/comburent per mantenir-se en l'estat estacionari de combustió. [1]

1.4. Introducció als simuladors CFD

Els models semi-empírics (SE) han estat utilitzats genèricament per a l'anàlisi de diferents accidents, tanmateix, aquests tenen certes limitacions que els fan poc útils en certs escenaris. És a dir, els SE no contemplen els obstacles en els escenaris d'incendis (factor molt determinant a tenir en compte, tant per la radiació com per al possible efecte domino).

El simuladors CFD donen la possibilitat als científics i enginyers a reproduir experiments en un laboratori virtual. Es presenta la següent taula, on s'exposen els principals avantatges i inconvenients de treballar amb simulacions o amb experiments empírics.

Taula 1: Avantatges i inconvenients de l'ús dels simuladors CFD en front als experiments.

[6]

	Experiments	Simulacions
AVANTATGES	1- Condicions d'operació pròximes a la realitat (sinó es fa cap escalatge).	1- No hi ha límit de quantitat per simular, això sí, s'han de dissenyar. 2- Alta resolució en espai i temps.
INCONVENIENTS	1- Límit en el rang de problemes. 2- Condicions d'operació limitades. 3- Número de punts de mesura limitats. 4- Temps de treball limitat. 5- Model a escala de laboratori. 6- Possibles errors: errors de mesura, pertorbacions de sondes, ...	1- Les condicions poden no ser del tot realistes. 2- Possibles errors: modelització, iteració, implementació, ...

Seguint amb l'anàlisi dels simuladors CFD, a continuació es comenten les equacions mandatàries que usen aquests tipus de simuladors.

Tot i que les equacions que regeixen el flux turbulent estan ben establertes per Bradshaw [7], aquestes solucions analítiques són principalment d'interès acadèmic, i les solucions discretes per simulació numèrica directa (DNS) només poden realitzar-se per sistemes ideals. En els últims anys, els models basats en les simulacions de Foucault (LES) han guanyat popularitat. No obstant, dins del context de les simulacions d'escenaris d'accidents industrials, la majoria de les eines CFD comercials, incloent-hi FLACS, encara depenen de models de turbulència en base a una mitjana de les equacions de Reynolds-Navier-Stokes (RANS), com ara el model $k-\epsilon$; "eddy viscosity

model”[8], complementat amb els models de sub-malla per tenir en compte la influència dels objectes que no es poden resoldre a la xarxa computacional. Les principals diferències dels tres models de turbulència comentats (DNS, LES i RANS) regeix en la capacitat de simular a petita, mitjana i gran escala. El model DNS és capaç de representar la turbulència en escenaris a petita escala, i els models LES i RANS, es diferencien per la menor necessitat de recursos computacionals en RANS per escenaris en grans distàncies.

Per fluxos reactius turbulents, cal afegir models per a les reaccions químiques, i per acoblar el sistema de model resultant de Hjertager [9]. Quan es tracta de descriure els sistemes industrials reals, és important per als usuaris de CFD tenir en compte que la majoria de les simulacions són difícils de resoldre, i que es requereix un grau significatiu de modelatge de sub-malla. Això implica que les solucions poden no convergir a mesura que augmenten les variables espacials o temporals a resoldre.

1.5. Introducció al simulador FLACS

FLACS treballa amb un codi CFD tri-dimensional, que resol les equacions de massa, moment, i energia, en un sistema de malla cartesiana utilitzant un volum finit. Aquestes equacions, es poden trobar detallades en la referència del manual de FLACS [10]. Els submodels més importants de FLACS són: el model de turbulència, combustió, radiació i sutge.

El model de turbulència de FLACS està basat en dues equacions, anomenat model $k-\varepsilon$. Tal i com s’ha citat anteriorment, el model “*eddy viscosity model*” resol dos equacions addicionals de transport, una per la cinètica de l’energia de turbulència i l’altra per l’energia cinètica de dissipació turbulenta.

En el model de combustió, les interaccions entre la turbulència i la química juguen un paper molt important, per això s’han de tenir en compte. Un paràmetre adimensional molt útil és el número Damköhler (Da), aquest ens dóna la relació entre la τ (l’escala de temps per la mescla turbulenta) i τ_c (l’escala de temps per la combustió química).

$$Da = \frac{\tau}{\tau_c} = \frac{\text{Temps per mescla de turbulència}}{\text{Temps per la mescla de comb. química}} \quad eq(1)$$

D’aquesta manera es pot saber quan el procés de reacció està dominat per el procés de difusió ($\tau > \tau_c$), la mescla dels reactius és lenta, i quan la reacció està governada per la química on el procés es regeix per una gran dissipació i mescla ràpida ($\tau < \tau_c$). [2]

Els dos models de radiació presentats en FLACS són el model DTM (“*Discrete Transfer Model*”) i el model de “*Six-flux*”. Els dos es presenten de manera més detallada en el pròxim apartat [5.2. Model de radiació en FLACS](#). Els dos models treballen amb l’equació RTE “*Radiative Transfer Equation*”, que treballa amb els camps d’absorció, emissió i dispersió. Cada un dels models la tracta de manera diferent, per tal de prioritzar diferents aspectes.

Finalment, el model de sutge també és detallat en el pròxim apartat [5.4. Model de sutge en FLACS](#). FLACS, treballa amb el model “*Fixed Conversion Factor*” (FCF), que funciona

calculant la quantitat de sutge a partir del combustible empleat, i el model “*Formation-Oxidation model*” (FOX), que es basa en la formació i oxidació del sutge a partir d’equacions de transport.

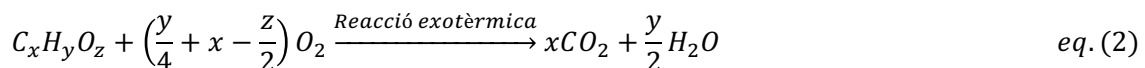
1.6. Fonaments teòrics

En el següent apartat es descriuran els conceptes més importants relacionats amb dinàmica d’incendis.

1.6.1. Fonaments teòrics de la combustió

La combustió es defineix com una reacció d’oxidació acompanyada d’un desprendiment de calor, o bé de llum i calor, amb flama o sense. Quan es produeix una combustió amb flama, aquesta pot esdevenir de dues formes diferents: flama de premescla i flama de difusió. La primera es dona quan el combustible i el comburent estan perfectament mesclats abans de cremar, i la segona, quan no ho estan (combustible i comburent es barregen en la regió on cremen). En els dolls de foc, es produeixen flames de difusió degut a que el combustible es manté separat de l’aire abans de que es produeixi la combustió. Aquestes flames de difusió poden ser laminars o turbulentes, segons la turbulència implicada en cada combustió ([1.6.3. Fonaments teòrics de la turbulència](#)).

La reacció genèrica de combustió és la següent:



En la realitat, el procés de combustió mai és perfecte o complet, degut a que la reacció química en els focs implica una sèrie de passos elementals en els quals es formen productes intermedis molt reactius (àtoms i radicals lliures). La complexitat augmenta amb la mida de l’estructura molecular del combustible (més complexes en sòlids que en gasos). Els passos que segueix el procés de combustió són els següents:

- 1- Els hidrocarburs reaccionen amb l’oxigen donant lloc a espècies inestables (radicals lliures).
- 2- Es produeix un alliberament de calor degut al procés d’oxidació.
- 3- L’oxidació es completa formant productes estables i els gasos de combustió (nitrogen, vapor d’aigua, diòxid de carboni i en menor mesura, monòxid de carboni, òxids de nitrogen i sutge).

La combustió en focs reals implica complexes reaccions exotèrmiques. La cinètica de les reaccions químiques és una branca de la química que compromet un gran estudi, amb la finalitat de saber la velocitat de combustió (formació de productes) i la velocitat d’extinció (degradació de productes). Aquesta velocitat de formació i degradació està directament influenciada per un gran nombre de condicions, tals com; concentració dels compostos químics, la pressió del entorn, la temperatura, presència d’un catalitzador o un inhibidor i els efectes de la transferència de calor.

Una d’aquestes condicions és la relació de combustible/comburent, per tal de definir la relació s’utilitza el paràmetre del radi equivalent ϕ , quan $\phi > 1$ la combustió és rica en fuel, quan $\phi < 1$ la combustió és rica en comburent i finalment, quan $\phi = 1$ la combustió procedeix en condicions estequiomètriques. El radi equivalent es calcula de la següent manera:

$$\phi = \frac{n_{comb.}/n_{ox}}{(n_{comb.}/n_{ox})_{st}} \quad eq. (4)$$

On: $n_{comb.}$: mols de combustible [mols o mols/s]
 n_{ox} : mols d'oxigen [mols o mols/s]
 st : condicions estequiomètriques

1.6.2. Mecanismes de transferència de calor

La radiació és un dels tres mecanismes de transferència de calor que es coneixen actualment. Els altres dos mecanismes són la conducció i la convecció.

La conducció és definida com el flux de calor que entra i travessa un sòlid, també intervé en els fluids però queda normalment emmascarada per la convecció ja que produeix un efecte de barreja en el fluid.

La segona llei de Fourier representa el fenomen de la conducció de la següent manera:

$$\rho \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = (\nabla k \cdot \nabla T) \quad eq. (5)$$

On: ρ : densitat del material [kg/m^3]
 C_p : calor específic del material [$\text{kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$]
 ∂T : variació de la temperatura [K]
 ∂t : interval de temps [s]
 ∇k : conductivitat tèrmica del material [$\text{W}/\text{m} \cdot \text{K}$]

La convecció és el mecanisme de transferència de calor cap a un sòlid o des d'un sòlid, degut al moviment del fluid que l'envolta.

L'equació que defineix l'efecte de la convecció és la següent:

$$\left(\frac{q}{S}\right) = (h \cdot \Delta T) \quad eq. (6)$$

On: h : coeficient de transferència de calor per convecció [$\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$].
 q : calor [W].
 S : superfície [m^2]
 ΔT : temperatura [K].

Finalment, i el més important en els dolls de foc, la radiació. La radiació es defineix com el mecanisme de transferència de calor que no necessita un medi per propagar-se. Aquesta es propaga mitjançant ones electromagnètiques a través del medi, emanades de cossos calents.

La llei que descriu el fenomen de la radiació és la llei d'Stephan-Boltzmann descrita a continuació:

$$E = \varepsilon \cdot \sigma \cdot T^4 \quad eq. (7)$$

Quan es vol calcular la radiació en una superfície allunyada, és necessari implementar el factor de visió, aquest té en compte la configuració geomètrica entre l'emissor i el receptor.

$$\left(\frac{q}{s}\right)_{rad} = E \cdot \varepsilon \cdot \sigma \cdot T^4 \quad eq. (8)$$

On: E: és la quantitat total d'energia emesa en forma de radiació o potència emissiva [W/m²].
 ε : l'emissivitat (varia de 0 a 1, en funció si és un cos negre (1) o no).
 σ : és la constant de Stefan-Boltzmann, $5.67 \cdot 10^{-8}$ en [W/m²K⁴]
 T: temperatura [K]

La radiació tèrmica és una forma important de transferència de calor en la majoria de sistemes de combustió. Per naturalesa, el flux de calor de radiació depèn de la temperatura a la quarta potència (equació de Stefan-Boltzmann). Això produeix que la radiació tèrmica sigui més rellevant que la pròpia convecció en la majoria de les flames, especialment quan les partícules de sutge estan presents en el sistema. A més, la radiació exerceix els seus efectes amb la distància i permet que l'energia viatgi directament des de regions calentes a regions més fredes. Una descripció acurada de la transferència de radiació tèrmica és un element crucial en les simulacions que hi intervenen flames amb alta turbulència.

Degut a la importància de la radiació tèrmica en les flames, els simuladors implementen meticulosament models per representar-la de forma acurada. Atès que la radiació és un fenomen de llarg abast, la conservació de l'energia ha de ser aplicat sobre tot el domini en qüestió en lloc d'un volum infinitesimal. Això fa que el càlcul es doni a terme mitjançant una equació integral amb set variables independents: la freqüència de radiació, els tres eixos de coordenades, dues coordenades descrivint la direcció de la radiació i el temps. A més, les propietats de transferència tèrmica dels productes són difícils de mesurar i sovint s'extreuen resultats erronis pel que fa a temperatura i longitud d'ona.

Els productes de la combustió tals com: el vapor d'aigua, el diòxid de carboni i el monòxid de carboni són els components més importants en la radiació no lluminosa en la majoria dels sistemes de combustió. Malgrat que hi ha altres compostos (no en el cas de la combustió amb propà), tals com el diòxid de sofre i els òxids de nitrogen, que també emeten i absorbeixen radiació en alta mesura, les concentracions d'aquestes espècies es troben en minoria respecte les altres mencionades anteriorment. És per aquest motiu que normalment es negligeixen. En concordança amb la teoria de Rayleigh, les espècies gasoses no tenen una dispersió significant, degut a que les partícules són molt petites comparades amb les longitud d'ona que intervenen en la transferència de calor. [11]

1.6.3. Fonaments teòrics de la turbulència

La turbulència és un dels fenòmens més importants a l'hora d'entendre el comportament del foc, el càlcul de la temperatura sempre es veu afectat degut a la turbulència que la flama presenta. Autors com Gómez [1] i Palacios [3] han publicat al respecte de les dificultats que el fenomen presenta.

La majoria dels incendis són per naturalesa turbulents. El moviment de flux turbulent és inestable amb una àmplia gamma de vòrtexs (remolins) generats per la tensió de cisallament degut a les fluctuacions de temperatura, composició de la mescla, temperatura, densitat, etc.

1.6.4. Fonaments teòrics del sutge

El sutge és una espècie formada a partir de una reacció química inacabada (combustió incompleta). El compost majoritari del sutge és el carboni impur, aquest presenta un color fosc provinent dels fums produïts en la combustió incompleta de combustibles orgànics (fusta, carbó, etc.). El sutge és un factor determinant ja que és capaç d'intervenir en factors tals com: la radiació emesa, la temperatura de la flama, etc. Tot i la influència del sutge en els dolls de foc, la seva presència és menor que en altres tipus d'incendis. Això es deu a que els dolls de foc es formen a partir d'una combustió més eficient, l'hidrocarbur surt a pressió del dipòsit i s'inflama al posar-se en contacte amb el comburent. La majoria del combustible implicat en la reacció, reacciona amb l'oxigen existent en l'aire i forma diòxid de carboni i aigua. En altres paraules, la combustió té un alt rendiment i la formació d'incandescent és menor. Aquests, són normalment formats quan part del combustible reactiu no pot reaccionar amb tot l'oxigen del aire i forma compostos, tals com, el sutge.

Malgrat la formació menor de sutge en els dolls de focs que en els incendis de bassal (per exemple), és necessari una bona aproximació de la seva formació per tal d'aconseguir resultats (temperatura i radiació) pròxims a la realitat. La formació de sutge és un fenomen difícil de calcular en la ciència del foc, degut a la falta de coneixement sobre la formació de sutge i el seu creixement. Els models simplificats i detallats es poden trobar en la bibliografia de Kennedy [12]. [13][11]

2. OBJETIUS

El simulador FLACS és un estàndard de referència en les simulacions de fuites i explosions, d'altra banda, aquest encara resideix en versions de proves pel que fa a la simulació d'incendis. Per això, neix la necessitat de validar el simulador i les seves possibilitats en aquesta tipologia d'accidents. Per tant, l'objectiu principal d'aquest treball ha sigut validar el programa i detectar possibles errors en els paràmetres obtinguts, a partir d'experiments realitzats. Aquests es van realitzar amb propà en un ambient no confinat i amb diferents mides de diàmetre de sortida del doll de foc.

Les tasques principals han estat:

1. La comprensió dels fenòmens relacionats amb els dolls de foc d'hidrocarburs.
2. Revisió dels incendis de doll duts a terme pel grup de recerca CERTEC.
3. Visió general de les tècniques de modelatge CFD i models involucrats.
4. Exploració i formació de codi FLACS-Fire (v.10.5).
5. Anàlisi de les simulacions descrites anteriorment, que impliquen incendis de doll d'hidrocarbur (propà) no confinat.
6. Anàlisi de resultats i comparació amb les dades experimentals.

3. ANTECEDENTS DE SIMULACIONS EN CFD

En el següent capítol es descriuran diferents treballs d'alguns dels autors que han treballat amb simuladors de foc, més concretament amb CFD. L'objectiu principal d'aquest capítol és analitzar els problemes que es van trobar i la possible necessitat de continuar amb l'estudi del camp de dolls de foc. La següent taula il·lustra les característiques de cada tesi.

Taula 2: Il·lustració dels diferents autors presentats en el capítol, així com les diferències en cada un d'ells.

Autor de la tesi	Simulació en qualsevol CFD	Simulació en FLACS	Simulació de doll de foc	Any de publicació
Jørgen Osenbroch	✓	✗	✓	2006
Lars Roar Skarsbø	✓	✓	✗	2011
Natalja Pedersen	✓	✓	✓	2012

3.1. Tesi doctoral "*CFD Study of Gas Dispersion and Jet Fires Incomplex Geometries*".

Jørgen Osenbroch [14] és un antecedent important a tenir en compte en les anàlisis de doll de foc amb simuladors CFD (concretament FLEXSIM). Osenbroch, va presentar la seva tesi doctoral anomenada; "*Estudi de CFD en dispersions de gas i dolls de foc en geometries complexes*" (en anglès: "*CFD Study of Gas Dispersion and Jet Fires Incomplex Geometries*") al 2006. La tesi duta a terme a Dinamarca, destaca per modelitzar els diferents escenaris canviant variables com: el vent, geometries, tipus de gas, direcció de la fuga, velocitat de la fuga, descàrrega de sortida, etc. Els resultats van ser validats a partir d'experiments realitzats per Johnson [15]. L'autor destaca l'influència del sutge en les simulacions i l'efecte que aquest té en la radiació i en els processos de combustió. Finalment, menciona la importància de continuar estudiant el paràmetre "*lift-off*" i una validació del model de radiació en dolls de foc en escenaris confinats.

Els dolls de foc es van realitzar a través d'un flux horitzontal i utilitzant (majoritàriament) metà com a combustible. Els experiments en qüestió es van dividir en 3 tipus:

Taula 3: Resum dels experiments de la tesi de Osenbroch. El cabal està en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$, la pressió interna en bar, la temperatura en K, el diàmetre en mm, velocitat del vent en m/s i la direcció del vent en graus.

Paràmetre	Cas C	Cas D	Cas E
Cabal	8,4	7,9	3,8
Pressió interna	2,1	11,1	66
Temperatura interna	267	279	281
Temperatura ambient	281	282	286
Diàmetre del orifici	152	75	20
Velocitat del vent	0,3	3,9	6,9
Direcció del vent	146	91	89

Els experiments estudiats per Osenbroch destaquen per tenir una gran variabilitat en les variables utilitzades. És a dir, valora diversos experiments on la velocitat del vent va de 0,3 m/s fins a 6,9 m/s, un cabal que canvia del $3,8 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ fins a $8,4 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i un diàmetre de sortida del combustible de 20 mm fins a 152 mm. És important tenir-ho en compte, ja que els experiments objecte d'estudi del present treball tenen unes especificacions força diferents. Tot i això, és rellevant conèixer els resultats que l'autor va obtenir i/o les limitacions que el programa va mostrar.

En el treball d'Osenbroch, els resultats dels tres casos es van comparar amb les mateixes característiques: estudiant la radiació tèrmica, sensors constants en la direcció radial i variant la direcció axial fins a 26 metres (flux de sortida es situava en 5 metres axials).

Els resultats dels experiments del cas C mostraven un error sistemàtic per sota del 50%, els experiments es van comparar amb la bibliografia Johnson [15] i els resultats del simulador (tenint en compte l'efecte del “*lift-off*” i sense tenir-lo en compte). Les gràfiques mostraven que l'efecte del “*lift-off*” no era rellevant i que aquests s'aproximaven molt a la bibliografia de Johnson [15]. D'altra banda, els resultats del cas D i E destacaven per mostrar una diferència significativa quan s'implementava el “*lift-off*” i quan no. En la majoria dels casos els resultats eren millors quan no s'implementava el fenomen tèrmic esmentat.

Ja per concloure l'anàlisi de la tesi d'Osenbroch, és important destacar que ell va donar més importància a l'anàlisi de les fuites que no a l'anàlisi del doll de foc. Tot i això, és important saber que els seus resultats de radiació tèrmica oscil·laven com màxim en un error del 50% (senyors posicionats a més distància axial). D'altra banda, és notori que l'autor no destaquí la importància d'implementar vent a les simulacions, ni la rellevància d'estudiar la temperatura en dolls de foc.

3.2. Tesi mestral *"An Experimental Study of Pool Fires and Validation of Different CFD Fire Models"*.

Lars Roar Skarsbø va finalitzar la seva tesi de màster a Noruega el 2011.

Skarsbø, comenta la importància de validar els programes CFD per tal de poder-los utilitzar en un futur de manera eficaç. L'autor va decidir validar els diferents simuladors a partir dels experiments (bassals de foc) realitzats per Steckler [16] i Gutiérrez [17]. Va decidir estudiar els paràmetres de velocitat d'alliberació de calor, radiació tèrmica, la temperatura, velocitat de la flama i els gasos calents del plomall i l'aire.

Les simulacions revelaven que els resultats de temperatura eren pròxims als resultats experimentals utilitzant els dos simuladors (FLACS i FDS). En FDS, la radiació tèrmica es podia predir de manera eficient quan el foc era definit a partir de la pèrdua de massa o la calor alliberada. Quan s'usava el model de combustible líquid, el simulador FDS calculava la velocitat d'evaporació per ell mateix, i els resultats depenien molt del disseny de la malla. També saberes important recalcar que els dos simuladors sobreestimaven els valors de temperatura en les flames.

3.3. Tesi *"Modeling of jet and pool fires and validation of the fire model in the CFD code FLACS"*.

Natalja Pedersen [2] també és un antecedent important en la simulació amb FLACS-Fire en focs (dolls de foc i incendis de bassal). Pedersen estudia l'efecte dels dolls de foc utilitzant dos combustibles, propà i etilè. En les simulacions d'etilè estudia el paràmetre de la velocitat del doll i la intensitat relativa de turbulència (RTI).

En les simulacions de propà, s'estudia diversos casos comparant-los amb els experiments de [3]. S'analitza l'alçada de la flama a partir de velocitats de sortida del hidrocarbur de 150 m/s a 250 m/s. Destaca que, les condicions de la mida de la flama van ser estimades a partir de les imatges infraroges, lllindar de temperatures i visualització subjectiva. El criteri de temperatura va ser estimat a partir dels límits de la flama que es podien veure en les imatges infraroges. Aquests, mostraven que en el punt més alt de la flama la temperatura ascendia fins als 1600K. Aquesta és comparada amb els seus resultats, que segons ella obtenia una temperatura màxima de 1500K.

La màxima desviació es va donar amb velocitats de sortida de 250 m/s. Pedersen també comenta que la distància *"lift-off"* augmentava amb dependència directe de la velocitat de sortida del doll. Finalment, posa en relleu que el simulador FLACS (versió v9) és incapaç de simular el *"lift-off"* de la flama, per això, els resultats amb una velocitat de sortida del doll superiors donaven resultats més distants dels que tenien una velocitat més petita.

Pedersen va validar el programa simulant amb els diversos submodels de combustió, radiació i turbulència. En el cas del model de combustió Pedersen va optar per utilitzar el model “*Eddy Dissipation Concept*” (EDC), el model de radiació utilitzat va ser el “*Discrete Transfer Radiation*” i el model de radiació “*k-e turbulence model*”. Amb aquests models, l'autora afirma que la interpretació del simulador envers la temperatura és força correcta, en canvi, quan treballava sense model de radiació (opció que el simulador dóna al usuari) els resultats de temperatura eren massa elevats. L'aproximació de la temperatura també augmentava amb el disseny d'una malla més estreta. Pedersen també va estudiar el model de formació del sutge, aquest presentava uns resultats molt pròxims a la realitat. Finalment, destaca que els resultats dels sensors de radiació anaven molt lligats al model del sutge utilitzat, ja que aquest és un factor important a l'hora de reproduir un comportament de l'alliberament de calor de la flama.

Malaauradament, el simulador FLACS-fire presentà una predicció força errònia en front a la longitud de la flama amb valors més elevats que en la realitat. Aquest problema pot ser degut a la limitació de la versió FLACS v.9 a l'hora de simular el “*lift-off*”. La limitació del programa per simular el fenomen esmentat, ve donat per el model EDC, aquest és incapaç de simular el fenomen l'extinció del doll de foc (fenomen “*blowout*” en el [capítol 1.3. Paràmetres importants en el fenomen dels dolls de foc](#)).

3.4. Conclusions dels autors estudiats

Taula 4: Resum dels diferents autors estudiats.

Autor de la tesi	Experiments propis	Estudi del vent	Doll de foc vertical	Rellevància de la malla	Resultats de temperatura acurats	Resultats de radiació acurats
Jørgen Osenbroch	X	✓	X	X	✓	✓
Lars Roar Skarsbø	X	✓	X	✓	✓	✓
Natalja Pedersen	X	X	✓	✓	✓	X

La taula anterior té com a principal objectiu obtenir una visió global de cada autor estudiat, per tal de corroborar la veracitat de les seves conclusions i destacar els punts forts i febles de cada tesi.

Primerament, és important saber quins autors van realitzats els seus propis experiments, degut a la importància de saber com s'han extret les dades i la rigorositat empleada en l'estudi experimental. Es pot apreciar que cap dels autors van realitzar els seus propis experiments, s'entén que l'execució dels experiments és una feina costosa i difícil de dur a terme.

Pedersen és l'única autora que no parla de la rellevància del vent (Palacios destaca en la seva tesi que els experiments realitzats van ser duts a terme amb un vent negligible). Skarsbø destaca que no va poder realitzar l'anàlisi dels seus experiments degut al paràmetre del vent, aquest influenciava fortament els resultats. Osenbroch, defineix en l'estudi dels experiments realitzats la velocitat del vent i la direcció que aquest tenia en cada cas (Taula 3). Tot i això, no comenta la seva influència en els resultats finals (podria ser degut a que l'autor estudia els dolls horitzontals).

La única tesi realitzada amb dolls de foc verticals és Pedersen, és important saber quins autors van realitzar treballs semblants per tal d'estudiar-los amb més rigorositat. A més, Pedersen també va realitzar les seves simulacions amb FLACS-fire.

La rellevància de la malla és un dels factors més determinants a l'hora de simular amb programes CFD. Això és degut a que la grandària de la malla repercuteix directament al temps establert per la simulació i és important saber fins quin punt s'ha de definir una malla petita. Tant Osenbroch com Pedersen afirmen que un disseny de malla petita afavoreix l'obtenció de bons resultats en les simulacions.

En el cas de l'estudi de la temperatura, tots els autors estan d'acord en que l'aproximació dels programes CFD és força bona. Tot i que Skarsbø i Pedersen també treballen amb incendis de bassals on l'aproximació de la temperatura resulta més complicada que els incendis de doll de foc.

Els dos autors que mostren els resultats de radiació, han realitzat els seus treballs en condicions sensiblement diferents. Destaca Osenbroch, per donar unes gràfiques molt clares a l'hora de mostrar els seus resultats de radiació. Ell considera que els valors de radiació són correctes quan l'error més gran oscil·la sobre el 50%. D'altra banda, Pedersen explica la rellevància del model de radiació en els resultats de la temperatura, però no mostra resultats puntuals de radiació. Com ja s'ha mencionat anteriorment, Pedersen treballa sobre els experiments realitzats per [3], i Palacios sí que va realitzar un ampli estudi en el fenomen de la radiació.

De forma global, hi ha pocs estudis que hagin estudiat el fenomen dels dolls de foc (verticals) en FLACS-fire. D'ells se'n pot concloure que:

- 1- El disseny d'una malla petita implica una aproximació més eficient als resultats experimentals. Malaauradament, la disminució de la grandària de la malla implica unes simulacions més lentes.
- 2- Els resultats dels sensors de temperatura s'aproximen als experiments en al majoria dels casos (parlant de dolls de foc).
- 3- El paràmetre del vent pot esdevenir un inconvenient a tenir en compte quan s'estudia els incendis.
- 4- Els resultats dels sensors de radiació es prenen com a correctes quan l'error oscil·la sobre un 50%.

4. EXPERIMENTS DEL CERTEC

En aquest apartat es detallaran els experiments realitzats al CERTEC en els últims anys, relacionats amb l'anàlisi de dolls de foc. Mercedes Gómez i Adriana Palacios van finalitzar la seva tesi doctoral al 2010 i 2012 respectivament. Es realitza un anàlisi de cada una de les tesis mencionades anteriorment, ja que és important conèixer com es van realitzar els experiments, les variables que es van tenir en compte, els problemes que es van trobar, els resultats que van esdevenir de cada tesi i les conclusions que les autores van exposar.

4.1. Tesi doctoral "*Estudio experimental y modelización matemática de dardos de fuego*"

Mercedes Gómez va realitzar la seva tesi doctoral sobre els dolls de focs, de manera experimental i posteriorment modelitzant-los matemàticament. Gómez valora positivament l'estudi dels dolls de focs, ja que aquests han augmentat considerablement degut a l'expansió industrial en els últims anys. També destaca que diversos estudis (Casal [18]) han demostrat que un dels accidents amb més freqüència són els incendis, i en aquesta casuística, els dolls de focs són altament desconeguts. Per aquesta raó, és necessari un ampli estudi per tal de predir el comportament del foc i les possibles conseqüències que aquest pugui tenir.

Gómez va realitzar els seus estudis a la zona de Can Padró, les instal·lacions disposaven de tres sensors tipus B de temperatura (per zones amb més temperatura, constituïts per Platí, 30% Rodi/Platí i 6% Rodi; error de mesura de 0,5 K), un sensor de temperatura tipus K (per zones amb menys temperatura, constituïts per Níquel, Crom/Níquel i alumini) i un sensor tipus S de temperatura (per zones amb menys temperatura Platí, 10% Rodi(+)/Platí; error de mesura de 1,5K)(Taula 9), tres sensors de radiació, una càmera de gravació infraroja, dues càmeres de vídeo, una estació meteorològica i un transmissor de pressió.

Els experiments realitzats, anomenats de la següent forma: JFP-006-03, JFP-006-08, JFP-006-07, JFP-006-02, JFP-005-05, JFP-005-04, JFP-005-011, JFP-005-012, JFP-005-08 i JFP-005-03 es van realitzar utilitzant diferents diàmetres (de 10 a 43 mm) i cabals de sortida (de 0,06 a 0,43 kg·s⁻¹). La nomenclatura utilitzada feia referència a "prova de doll de foc" ("*JFP: Jet Fire Proof*"), número de la prova i número del experiment realitzat al mateix dia. El combustible utilitzat va ser propà, l'altura de les flames es va determinar de 8 metres (sense tenir en compte el fenomen de "*lift-off*"), la velocitat màxima del vent mesurada va ser de 3,5 m/s i la radiació tèrmica es va determinar entre 3 i 20 MW.

Cal destacar que l'autora només va analitzar experiments amb velocitats de sortida sònica i experiments on el combustible estigués en fase gasosa, aquest era propà comercial (97% propà, 1.5% butà i 1,5% d'altres). El GLP estava en forma líquida en el dipòsit que el contenia (de volum de 4 m³) i s'evaporava ràpidament al fluir per la tubera que unia el dipòsit i el filtre previ al

contacte amb l'exterior. Transcorreguts uns instants, el combustible que sortia passava a ser una mescla bifàsica.

Els sensors de temperatura utilitzats van ser cinc (tres de classe B, un de classe K i un de classe S), anomenats de la següent manera: TK, TB1, TB2, TB3 i TS. Aquests estaven disposats en l'espai segons la següent distribució.

Taula 5: Posicions dels sensors de temperatura. Les posicions X, Y i Z estan expressades en metres.

Sensor	Posició en X	Posició en Y	Posició en Z
TK	0	0	0,5
TB1	0	0	1,82
TB2	0	0	2,65
TB3	0	0	3,66
TS	0	0	4,46

Els sensors de radiació utilitzats van ser tres, anomenats de la següent forma: RAD94R, RAD92 i RAD91. Aquests estaven disposats en l'espai segons la següent distribució.

Taula 6: Posicions dels sensors de radiació. Les posicions X, Y i Z estan expressades en metres.

Sensor	Posició en X	Posició en Y	Posició en Z
RAD94R	1,11	0	0,92
RAD92	3	0	1,5
RAD91	5	0	1,5

Per tal d'entendre millor la configuració espacial de tots els actors implicats, es mostra una figura d'una de les publicacions de Gómez. [19]

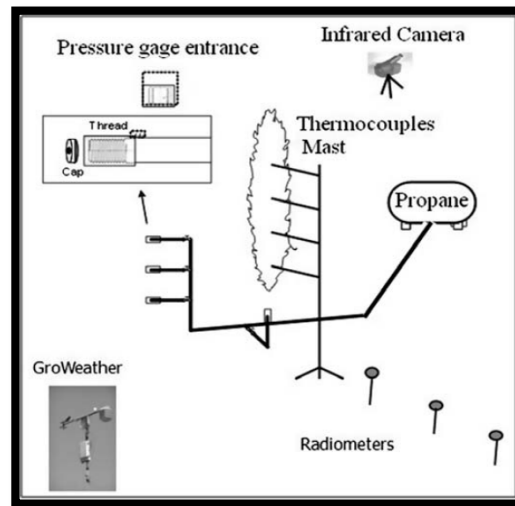


Figura 2: Representació espacial dels experiments realitzats per Gómez. [19]

Per tal d'implementar un sistema eficaç per al càlcul de diferents experiments amb cabals de sortida, Gómez va construir diferents filtres per tal de modificar els diàmetres de sortida i poder seguir utilitzant la mateixa canonada. Els filtres utilitzats van ser els següents:

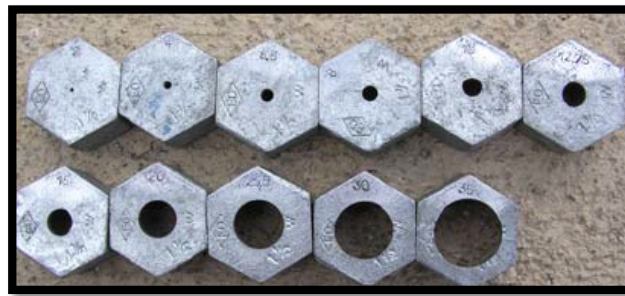


Figura 3: Filtres utilitzats per modificar el diàmetre de sortida del combustible.

La següent taula mostra els diferents experiments amb les seves variables.

Taula 7: Diferents experiments realitzats per Gómez, M. Els diàmetres de sortida estan mesurats en mm, la velocitat del vent en m/s, la duració de la combustió en segons, cabal en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i la longitud de la flama en m.

Experiment	Diàmetre de sortida	Velocitat del vent	Duració de la combustió	Cabal	Longitud de la flama
JFP-006-03	30	0	13	0,25-0,34	7,16
JFP-006-08	43	3,5	18	0,47-0,50	n/c
JFP-006-07	20	1,9	26	n/c	6,19
JFP-006-02	12,75	1,25	42	0,2-0,21	4,00
JFP-005-05	10	n/c	60	n/c	3,30

JFP-005-04	10	n/c	69	n/c	3,16
JFP-005-011	15	n/c	108	n/c	4,02
JFP-005-012	15	n/c	60	n/c	4,89
JFP-005-08	20	n/c	31	0,02-0,16	6,01
JFP-005-03	25,5	n/c	48	n/c	5,80

És important fer èmfasi amb les velocitats de sortida del combustible, ja que Gómez explica que només va analitzar els experiments que presentaven velocitat sònica. Degut a que normalment en els fenòmens de doll de foc les velocitats sempre són sòniques, d'altra banda, quan les velocitats són subsòniques generalment el fenomen és considerat com una torxa.

Les torxes són utilitzades àmpliament en la indústria per eliminar gasos voluntàriament, com a millor forma de valorització (aprofitament energètic) o com a mesura de seguretat (fuita perillosa). Per tal de poder calcular quins experiments presentaven unes condicions de doll de foc (velocitat sònica) i quines no (velocitats subsòniques), l'autora va utilitzar la següent expressió.

$$\frac{p_a}{p_v} < \left[\frac{2}{\gamma + 1} \right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad eq. (9)$$

On: p_v : pressió del combustible a la sortida [Pa]

p_a : pressió ambient [Pa]

γ : relació dels calors específics del combustible (c_p/c_v)

c_p : calor específic a pressió constant [KJ/kg·K]

c_v : calor específic a volum constant [KJ/kg·K]

També mereix especial atenció l'anàlisi de l'autora referent al càlcul de la temperatura de la flama. És important saber com es va realitzar i les possibles diferències que puguin haver-hi al representar-se a partir d'un simulador. Gómez va calcular la temperatura a partir dels sensors de temperatura esmentats anteriorment, i, paral·lelament, va determinar dues expressions experimentals que relacionaven l'altura i el calor de combustió amb la temperatura.

En el cas de l'altura, les mesures es van poder recollir a partir de les càmeres infraroques (a vegades les flames no eren visibles, Figura 4). Per cada imatge infraroja (4 imatges per segon) de les proves seleccionades es va obtenir l'altura de la flama (en píxels) i la posició p dels sensors de temperatura, expressats en percentatge. Per tal de poder obtenir l'altura dels sensors en metres, era necessari utilitzar la següent expressió (eq.3), on es podia saber el percentatge de la posició de cada sensor (p) referent a la longitud total (Z_p) i la longitud total en píxels (L_p). Finalment, només calia multiplicar per l'equivalència d'un píxel a metres. Les Figuras 5 i 6 il·lustren les variables explicades anteriorment.

$$p = \left(\frac{Z_p}{L_p} \right) \cdot 100 \quad eq. (10)$$

On: Z_p : distància en píxels de cada sensor a la base de la flama

L_p : longitud en píxels de la flama

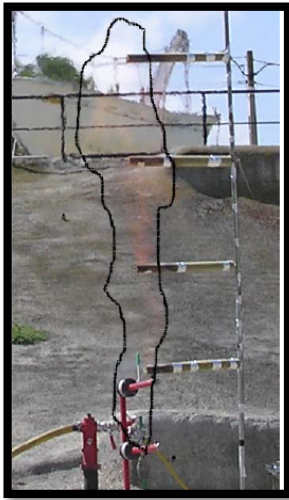


Figura 4: Fotografia de flama no visible.

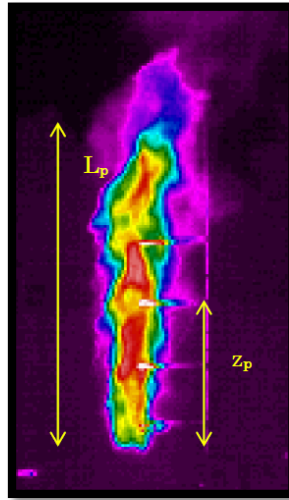


Figura 5: Longituds de la flama L_p i Z_p a partir d'imatge infraroig.

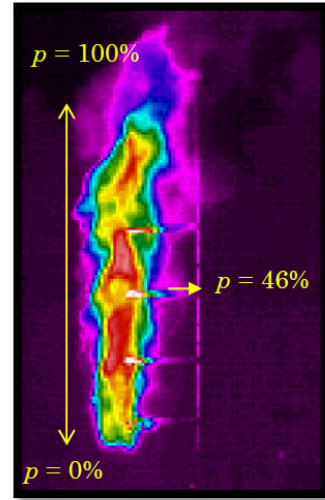


Figura 6: Percentatge de la longitud de la flama en píxels.

D'aquesta forma es podia representar la longitud de la flama amb la seva temperatura (Figura 7). Finalment, es va determinar la següent expressió empírica:

$$T = 1190 + 21,2p - 0,18p^2 \quad eq. (11)$$

On: p : posició axial expressat en %
 T : temperatura de la flama en [K]

Les gràfiques mostraven la següent forma.

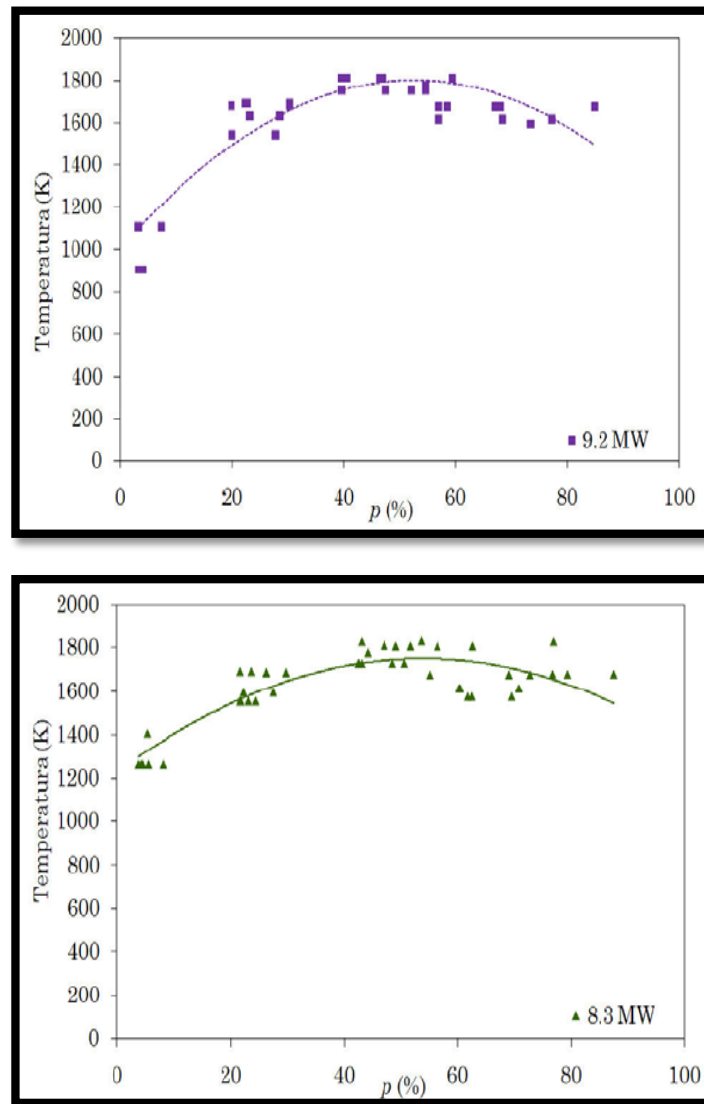


Figura 7: Representació de la temperatura en funció de l'altura de la flama.

Per calcular la calor de combustió màxima, l'autora va utilitzar la següent expressió:

$$Q = \Delta H \cdot m \quad eq.(12)$$

On: Q: calor màxima de combustió [KW]

ΔH : calor de combustió [KJ/Kg]

m: cabal màssic [$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$]

És important definir la calor màxima de combustió aquesta apareix en un sistema quan no es tenen en compte les pèrdues d'energia. Per tant, és la calor total que allibera un compost al oxidar-se per unitat màssica. D'altra banda, aquests sistemes ideals no s'assimilen al comportament real, ja que en la realitat la combustió pot no ser complerta.

Gómez va treure dues expressions que mereixen menció. La primera (eq.13) a partir de la calor màxima, i la segona (eq.14) a partir del caudal, amb ambdues es pot obtenir la temperatura en

qualsevol posició axial de la flama. Tanmateix en la segona expressió (eq.14) s'han d'utilitzar diferents constants per cada rang de posició axial (Taula 8).

$$T = \frac{15480}{(12,07 - \ln Q)} \quad eq. (13)$$

$$T = A + B \cdot m - C \cdot m^2 \quad eq. (14)$$

On: A-B-C: constants en funció de la posició axial de la flama

m: cabal màssic [$\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$]

Q: calor màxima de combustió [MW]

T: temperatura [K]

Taula 8: Constants en funció del rang axial de la flama. A en [K], B en [$\text{K/s} \cdot \text{kg}$] i C [$\text{K} \cdot \text{kg}^{-2} \cdot \text{s}^{-2}$]

Rang de posició axial	A	B	C
15%-25%	1057,1	3285,8	9755,5
25%-35%	1223,9	1927,8	5614,9
45%-55%	1302,1	2448,0	7761,7
40%-60%	1378,6	1671,2	6281,7

Les expressions presentades anteriorment (eq.4 i eq.6/7), podran servir per comparar els resultats del present treball amb els resultats de Gómez.

En la tesi doctoral de Gómez, es destaca la diferència que es va trobar en els resultats quan el combustible estava en fase gasosa o en mescla bifàsica. La primera mostrava una longitud de flama i fraccions de radiació menors que la mescla bifàsica. La longitud de les flames va ser determinada a partir de les imatges infraroges i es va observar que la longitud augmentava amb el cabal.

Finalment, l'autora destaca en les conclusions l'aproximació que el programa (FDS) dona dels resultats de temperatura, radiació i altura de la flama en front els valors experiments. La temperatura s'aproxima en un 14% als resultats experimentals, la altura de la flama en un 30% en els millors casos i la radiació en un 50%. Conclou explicant el potencial que té el programa en les simulacions de foc, però que encara necessita certes millores per representar un comportament més fiable a la realitat.

4.2. Tesi doctoral "Study of Jet Fires Geometry and Radiative Features"

Adriana Palacios també va realitzar experiments en dolls de foc al CERTEC, concretament van utilitzar el mateix camp de pràctiques de seguretat ubicat al centre de proves de Can Padró, al municipi de Sant Vicenç de Castellet. Palacios va realitzar la seva tesi doctoral en l'estudi de la geometria dels dolls de foc i les característiques de radiació que aquests posseeixen.

Palacios va descriure noves metodologies per predir els efectes dels dolls de foc (tant en velocitats de sortida subsònica com sònica), les metodologies van ser implementades a partir d'un estudi experimental (dolls a gran escala) i a partir d'una modelització matemàtica tenint en compte les característiques més importants de la flama (la grandària i la forma). Més específicament, va haver de realitzar diferents tasques, tals com: dissenyar i construir els experiments de dolls de foc a gran escala, identificar i obtenir les característiques més importants de la flama (alçada, forma, distància “*lift-off*”, poder emissiu i emissivitat de les flames), modelitzar matemàticament la grandària i la forma de la flama, obtenir expressions per predir la grandària de la flama, etc.

De la mateixa forma que l'autora anterior, Palacios va realitzar els seus experiments utilitzant GLP (gas liquat a pressió; 97% propà, 1.5%butà i 1,5% d'altres gasos com el hidrogen, nitrogen i metà) com a combustible. Es van realitzar un total de 20 experiments en condicions de velocitats de sortida sòniques i subsòniques, es va determinar una amplada de les flames fins a 1,5 metres, una longitud de fins a 10,3 metres i un cabal de sortida de $0,01 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ fins a $0,54 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$.

Palacios va utilitzar una disposició molt semblant al de l'autora anterior.

Taula 9: Sensors de temperatura utilitzats per Palacios [3].

Tipus	K	S	B
Composició	Níquel- Crom vs. Níquel- alumini	Platí – 10% rodi vs. Platí	Platí -30% radi vs. platí – 6% de rodi
Rang de temperatura màxim	-200°C fins 1250°C	0°C fins 1450°C	0°C fins 1700°C

S'ha volgut detallar el tipus de sensor utilitzar per Palacios, ja que el tipus K opera en un rang que ens pot donar a entendre certs resultats en la present tesi.

A continuació es mostra una fotografia real de la disposició dels sensors de temperatura.



Figura 8: Fotografia real de la disposició dels sensors de temperatura. [3]

L'anàlisi del càlcul de la temperatura va ser duta a terme mitjançant diversos mètodes. Primerament, utilitzant els sensors de temperatura esmentats prèviament i seguidament amb la càmera. És important saber que a partir de les càmeres infraroges es van poder obtenir els resultats de radiació (a partir de la potència emissiva de la flama). Les següents imatges (Figura 9 i Figura 10) mostren els resultats d'un dels experiments realitzats.

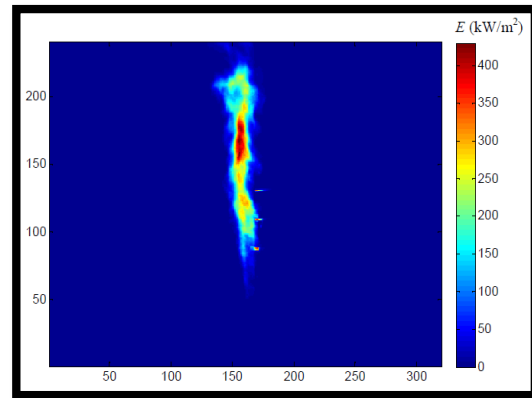
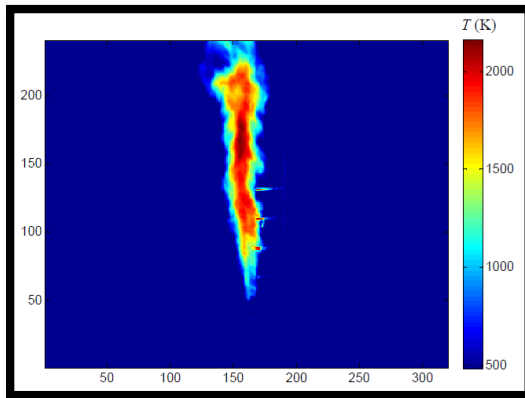


Figura 9: Distribució axial de la temperatura a partir de la càmera infraroig. Doll de foc de 43,1 mm d'orifici de sortida i emissivitat de 0,35. [3]

Figura 10: Distribució axial de la potència emissiva de la flama a partir dels resultats de temperatura. Doll de foc de 43,1 mm d'orifici de sortida i emissivitat de 0,35. [3]

En l'estudi de la radiació, Palacios fa una anàlisi molt interessant per tal d'obtenir l'emissivitat que s'assimila més al comportament real. A partir del anàlisi de les imatges infraroges i el processat a partir del simulador MATLAB s'obtenen resultats que es poden comparar amb els sensors de radiació. Confrontant-los, es pot saber quin model s'assimila més a la realitat. La següent Figura mostra el resultat obtingut, on es pot veure que l'emissivitat més idònia oscil·la entre 0,35 i 0,4.

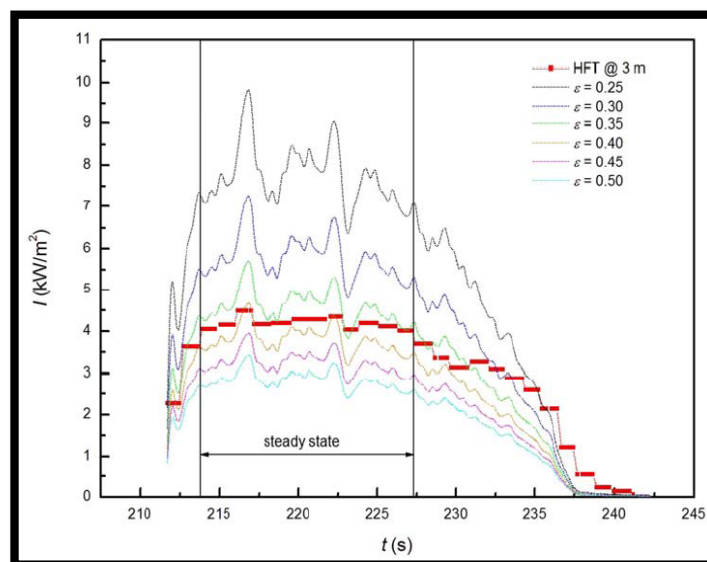


Figura 11: Estudi de l'emissivitat de Palacios. Doll de foc de 20mm. [3]

Palacios realitza diverses anàlisis de la radiació i temperatura, per exemple estudia el comportament de la flama a partir de tres regions diferents (explicat en l'apartat anterior).

L'autora destaca que va realitzar una ampla recerca bibliogràfica, per veure si hi havia estudis previs en el camp dels dolls de focs a gran escala. Explica que la recerca bibliogràfica mostrava que només hi havia un nombre reduït d'estudis amb dolls de focs. A més, la majoria d'aquests estaven realitzats amb dolls de focs relativament petits i amb velocitats de sortida subsònica. Paradoxalment, la necessitat d'estudiar els dolls de focs resideix en l'aplicació industrial, en aquesta casuística, els dolls de focs són a gran escala i amb velocitats de sortida sònica.

Finalment, Palacios exposa diversos punts en les seves conclusions que poden ser interessants. Tal i com ja mostrava Gómez [1], els dolls de focs bifàsics es distingeixen de manera rellevant dels dolls de foc gasosos, en termes de menys lluminositat, poder emissiu i grandària. Els dolls de focs bifàsics destacaven per ser més lluminosos degut a una combustió més pobre i un poder emissiu superior. En termes de modelització matemàtica, l'autora explica haver trobat una equació (inèdita fins al moment) per calcular l'alçada dels dolls de foc amb velocitats de sortida sònica per tres combustibles diferents (propà, metà i hidrogen).

5. SIMULADOR FLACS-FIRE

En el següent apartat es descriuran els models principals que el simulador FLACS incorpora per poder simular incendis. És important saber la base teòrica que utilitza el simulador per calcular els diversos escenaris (llegir capítol [1.6. Fonaments teòrics](#)). La versió del simulador utilitzada ha sigut la versió v.10.5.

5.1. Model de combustió en FLACS

FLACS intenta reproduir la combustió per incendis amb flames de difusió turbulenta amb l'aproximació de “*Eddy Dissipation Concept*” (EDC). Per flames amb poca turbulència o nul·la és possible utilitzar el model “*Mixed Is Burn*” (MIB), el problema de simular flames amb poca turbulència és que el simulador pot tenir dificultats a l'hora de córrer la simulació i assimilar que la combustió finalitza (apagant la flama). El model EDC, s'utilitza per defecte per calcular el terme font en la difusió de flames turbulents [10].

En general, el model que recomana el manual de FLACS és el EDC. Aquest, pot operar en reaccions ràpides i detallades i l'extinció pot ser programada. El concepte principal del model regeix en la interacció entre el flux turbulent i la reacció química. La interpretació física pot ser trobada per Magnussen [20].

Cal destacar, que el model EDC opera en concepte de cascada, on l'energia cinemàtica de turbulència és transferida pas a pas des de el flux principal fins a l'estructura més petita. Així, el concepte treballa de tal manera que en estructures grans resideix la major quantitat d'energia cinètica, i en estructures més petites (últimes en la línia de cascada), i resideix la freqüència més gran i les forces viscoses. L'assumpció principal del model es basa en què la reacció química té lloc en estructures homogènies. Aquestes es defineixen per tenir una dissipació de turbulència gran i es considera que la pressió és constant al llarg de tota la zona de treball. [2]

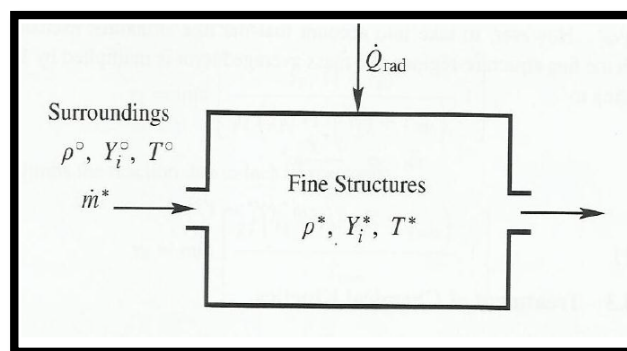


Figura 12: Estructura del model homogeni de combustió [2]

5.2. Model de radiació en FLACS

La radiació tèrmica juga un paper vital en la transferència de calor. Així doncs, els simuladors com FLACS necessiten un model acurat de càlcul de radiació per extreure resultats coherents.

El simulador “*FLACS-Fire*”, resol les equacions de continuïtat, moment i d’entalpia. Per resoldre les equacions d’entalpia, és necessari una terme font de radiació. L’equació general de conservació d’energia per fluid compressius és donada per (Modest, 1993):

$$\rho C_v \frac{DT}{Dt} = \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \nabla \cdot \mathbf{q}_R - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \mu \varphi + Q''' \quad eq. (15)$$

On: T: temperatura [K]

v: velocitat del vector [m/s]

\mathbf{q}_R : la calor de radiació [MW]

Q''' : la calor generada al llarg de tot el medi [MW]

L’equació emprada per descriure la intensitat de la radiació és la “*Radiative Transfer Equation*”, en endavant RTE. És una equació de tipus integral/diferencial. És donada per Siegel i Howell [21]:

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu, \varphi)}{d\tau} = -I(\tau, \mu, \varphi) + (1 - \omega) I_B[T] + \frac{\omega}{4\pi} \int_{\mu'=-1}^1 \int_{\varphi'=0}^{2\pi} I(\tau, \mu, \varphi) \varphi(\mu', \varphi'; \mu, \varphi) d\mu' d\varphi' \quad eq. (16)$$

On: μ : cosinus de l’angle polar θ

φ : angle azimutal

I: intensitat a través de la direcció μ

φ : profunditat òptica

I_B : intensitat del cos negre espectral a una temperatura T

ω : angle de dispersió

φ : funció de dispersió

El model de radiació està disponible en el simulador FLACS, quan aquest opera per simulacions d’incendis. És possible escollir tres alternatives: “*Discrete Transfer Model (DTM)*”, “*Six-Flux*” i “*None*”(cap model).

El model DTM es considera com el model més acurat, i per això el simulador el considera per defecte. És descrit com el model que exigeix més a l’hora de computar la simulació, però en conseqüència dóna uns resultats més acurats tant de temperatura com de radiació, també segueix una aproximació lineal en punts pròxims a la flama com en punts més distants.

El model “*Six-flux*” és defineix com la possible alternativa al model DTM. Aquest nou model, no és tant exigent a l’hora de computar les simulacions, però els resultats no són tant acurats com el model anterior. D’altra banda, destaca per unes bones aproximacions en la temperatura de la flama i el sutge. [2]

El model “*Six-flux*” resol l’equació RTE aproximant-la a sis equacions diferencials de primer ordre. A efectes pràctics, el model “*Six-flux*” té l’avantatge de ser simple i treballar més ràpid que el DTM, però en conseqüència planteja les següents limitacions:

- 1- En cas de gasos transparents, la radiació passa d’una superfície a una altre sense afectar al gas. El model “*Six-flux*”, no pot calcular acuradament els resultats en la situació descrita, degut a que la transmissió dels resultats és en direcció dels eixos de coordenades i negligeix l’efecte dels cossos opacs.
- 2- Les úniques interaccions que rep el model són a partir de la dispersió, aquestes apareixen entre els fluxos de radiació en les diferents direccions dels eixos de coordenades.
- 3- El model no s’estén fàcilment a sistemes de coordenades cartesianes, treballa millor en cilíndriques o polars.

El model “*none*” no es recomana, degut a que es negligeix per complert l’efecte de la radiació. És ben sabut, que les flames emeten una radiació considerable, i que aquesta és fortament consistent per tenir-la en compte en diferents situacions. N’és un exemple l’efecte dominó, on la radiació pot considerar-se com un factor plenament decisiu per el desenvolupament d’una explosió, d’una fuga, etc.

5.3. Model de turbulència en FLACS

En FLACS, la turbulència és calculada a partir de dues equacions, el model s'anomena “*k-ε model*” (“*Eddy viscosity model*”), basat en el model RANS (“*Rans Averaged Navier-Stokes*”, mirar capítol [1.4. Introducció als simuladors CFD](#)) que descriuen el moviment d'un fluid a partir d'un conjunt d'equacions de derivades parcials no lineals.

El model resol dues equacions addicionals de transport, una per l'energia cinètica turbulenta i l'altra per la velocitat de dissipació de l'energia turbulenta. Assumint la hipòtesi de “*Boussinesq eddy viscosity*” sobre el model de “*Eddy viscosity model*” es pot treure el tensor de força de Reynolds.

$$-\rho \overline{u_i'' u_j''} = \mu_{eff} \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} + \frac{\delta u_j}{\delta x_i} \right) - \rho \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad eq. (17)$$

Adicionalment, es mostren els valors implementats en l'eq.17 que el simulador FLACS utilitza.

$$C_\mu = 0.09 \quad C_{1\epsilon} = 1.44 \quad C_{2\epsilon} = 1.92 \quad C_{3\epsilon} = 0.9$$

5.4. Model de sutge en FLACS

Actualment, hi ha dues aproximacions per modelar el sutge en FLACS, “*Conversions Factor Model*” (CFM) o “*Fixed Conversion Factor*” (FCF) i el “*Formation-Oxidation model*” (FOX).

El model CFM es basa en fer una aproximació de la fracció de carboni que passarà directament a ser sutge. Aquesta conversió depèn de la composició del combustible i és independent del rati equivalent ([1.6.1. Fonaments teòrics de la combustió](#)), temperatura, temps, etc. L'única manera de poder entrar la conversió del sutge és a partir del “*Soot yield*”, que mostra la fracció de carboni convertida en sutge. El manual de FLACS [10], mostra la següent llista (mostrada parcialment) on es pot veure la conversió del sutge a partir de diferents combustibles. La majoria dels valors provenen de la literatura de Kent (Kent, 1986). D'altra banda, la conversió de sutge també depèn del tipus d'incendis, ja que en un doll de foc la combustió és més eficient que en un basal de foc.

Taula 10: Recomanacions del manual de FLACS per utilitzar en el model FCF. [10]

Espècies	Conversió d'incandescents
Metà	0.7%
Età	2%
Propà	9%
Butà	10%
Pentà	10%
Hexà	10%
Heptà	12%
Octà	12%

El model FOX consta de dos termes fonts en l'equació del sutge. Un dels quals, és per la formació del sutge, i l'altre prové de l'oxidació (combustió) del sutge. La formació del sutge és un procés lent, en particular la formació dels nuclis requereix una mescla rica en combustible, una certa

temperatura i un temps determinat. Quan els nuclis estan presents, el sutge es pot formar ràpidament. Per la modelització de la formació i oxidació dels nuclis, és necessari una altra equació de transport. Aquestes equacions, es poden trobar en el manual del FLACS [10].

5.5. Model de doll en FLACS

La implementació del doll de foc en FLACS, es basa en dues possibilitats: quan la velocitat de sortida és subsònica i quan és sònica ([6.1. Assumpcions prèvies](#)). Les possibilitats es descriuen en els següents apartats.

5.5.1. Model de doll per velocitats subsòniques

En el cas de velocitats subsòniques el model s'anomena: “model d'arrossegament” (“*Entrainment model*”), que funciona de la següent manera:

El model d'arrossegament descriu el desenvolupament d'un doll turbulent i es basa en els següents supòsits:

- 1- El doll està dominat per impuls (anomenat raig pur) de manera que l'arrossegament es determina pel corrent de cisallament.
- 2- El fluid ambiental dels voltant es manté en repòs.
- 3- Els perfils de velocitat, concentració i temperatura radials són uniformes.
- 4- El flux del doll es considera estacionari.
- 5- El doll és simètric en els eixos de coordenades.
- 6- Els fluxos turbulents escalars i l'impuls són proporcionals als valors mitjans.
- 7- L'arrossegament de massa és proporcional a la velocitat del raig.

Els supòsits 1 i 2 reflecteixen el propòsit del model, que és el de descriure la regió de camp proper, on la velocitat del doll és alta en comparació amb la velocitat de l'ambient. El supòsit 3 és coherent amb l'aplicació de malla refinada del model. Els supòsits 4, 5 i 6 estan amb concordança amb l'alliberament típic de condicions de pressió. I finalment, l'assumpció 7 és la hipòtesi d'arrossegament clàssic dels processos turbulents en la formulació integral.

5.5.2. Model de doll per velocitats sòniques

El model de doll per velocitats sòniques és implementat a partir de l'eina “*Jet Utility Program*”, aquests està basat en un model mono-dimensional per la fuga d'un gas ideal, des d'un escenari confinat a pressió, passant posteriorment a través d'un orifici, i finalment, sortint a una atmosfera oberta. El model assumeix una única fase (fase gas) en tots els instants. El simulador té en compte un únic xoc pla, degut a que un xoc d'estructures tri-dimensionals complicaria massa el càlcul. El flux de gas és tractat de forma reversible adiabàticament (isentropic, sense viscositat) des de

l'interior del dipòsit, on el gas està inicialment en repòs, fins a la zona de l'orifici de sortida (punt 1 de la Figura 13).

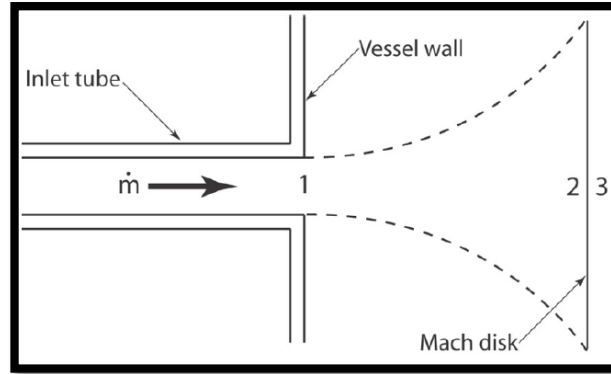


Figura 13: Esquema del funcionament del jet. [10]

Generalment, hi ha una velocitat de sortida sònica (“*choked*”) a l'orifici i una velocitat supersònica (expansió) entre l'orifici i el xoc (“*Mach disk*”), aquest és localitzat en la interfase entre l'etapa 2 i l'etapa 3 (Figura 13). En aquest punt, l'expansió és modelitzada a través d'un procés adiabàtic per gasos compressibles, és a dir, s'aplica una conversió de massa, moment i energia (però no hi ha una assumptió isentròpica). El canvi termodinàmic al llarg del xoc no és isentròpic, en aquest cas s'aplica les relacions de “*Rankine-Hugoniot*”, les quals assumeixen que la pressió justament en la sortida del xoc (posició 3 de la Figura 13) és igual a la pressió atmosfèrica.

És important saber que el model negligeix el possible arrossegament de l'aire (gas ambient) en la regió 2 fins l'hipotètic filtre de la posició 3, aigües avall del front de xoc. És en aquesta posició 3 (i en l'àrea d'expansió), on el programa informa de la sortida del doll calculant la dinàmica de fluids a partir d'un model que no té en compte l'arrossegament.

És recomanat utilitzar la funció JET del simulador sempre i quan l'escenari utilitzat tingui un rang de variables adequades (assumint la llei de gasos ideals, en pressions màximes de 100-150 bar en condicions normals de temperatura). D'altra forma, el simulador implementa una eina alternativa a partir de crear la fuita manualment.

Les condicions en el doll a la sortida són determinades assumint una expansió isentròpica des de les condicions on el combustible està en repòs fins la sortida:

$$\frac{p_1}{p_0} = \left(\frac{2}{\gamma + 1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad eq. (9)$$

$$\frac{T_1}{T_0} = \frac{2}{\gamma + 1} \quad eq. (18)$$

$$\rho_1 = \frac{\rho_0 M}{RT_1} \quad eq. (19)$$

$$v_1 = c_1 = \sqrt{\frac{\gamma R T_1 10^3}{M}} \quad eq. (20)$$

$$m = \rho_1 v_1 A_1 \quad eq. (21)$$

- On: p_1 : pressió abans de la sortida del doll [atm]
 p_0 : pressió en la sortida del doll, normalment s'estima com l'atmosfèrica [atm]
 γ : coeficient de dilatació adiabàtic, relació $\frac{c_p}{c_v}$ s'estima 1,23
 T_1 : temperatura abans de la sortida del doll [K]
 T_0 : temperatura en la sortida del doll [K]
 ρ_1 : densitat del combustible en la sortida del doll [K]
 v_1 : velocitat del doll [m/s]
 R : constant dels gasos ideals; 8,314 [KJ/kmol·K]
 M : massa molar del combustible [kg/kmol]
 m : cabal del combustible [kg·s⁻¹]
 A_1 : àrea del orifici del combustible [m²]

El programa assumeix que hi ha diferents variables que necessiten ser introduïdes per l'usuari per tal d'implementar el càlcul. Aquestes variables són p_0 , T_0 , A_1 , M i γ . A partir d'aquestes variables (segons convingui a l'usuari implementar) serà possible el càlcul de m , per exemple.

Assumint expansió adiabàtica en la zona 1 fins a 2 (Figura 14), s'aplica un balanç de moment mono-dimensional (ignorant l'arrossegament i la viscositat) per calcular totes les variables rellevants en l'instant 2 i 3, per exemple: la velocitat en 2, temperatura en 2, temperatura en 3, etc.

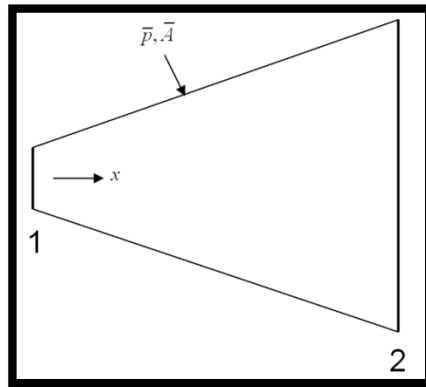


Figura 14: Diagrama de l'expansió adiabàtica del gas. [10]

En el manual de FLACS, costen totes les hipòtesis i equacions que el simulador utilitza per el càlcul de totes les variables implicades en els punts 2 i 3 ja esmentats (referents a la Figura 14).

6. SIMULACIÓ DELS EXPERIMENTS DE DOLLS DE FOC DEL CERTEC AMB FLACS-FIRE

Els aspectes que cal considerar amb detall per simular els experiments de dolls de foc del CERTEC són els següents: malla, cabal, direcció i/o implementació del vent, model de radiació, model de combustió i la emissivitat. A partir del capítol [3.4. Conclusions dels autors estudiats](#), es poden deduir les següents assumpcions:

- Les malles que haurien de reproduir comportaments més realistes haurien de ser les malles més petites.
- La variable del vent és molt rellevant en els fenòmens de foc.
- Model de radiació utilitzat per Pedersen [2] va ser el DTM.
- Model de combustió utilitzat per Pedersen [2] va ser EDC.
- Els resultats dels sensors de radiació poden estimar-se com a “bons” a partir d’un error del 50% segons Osenbroch [14].
- Els diferents autors expliquen que els resultats dels sensors de temperatura s’assimilen força als resultats empírics.

Tot i sabent que les diverses variables interactuen entre elles per obtenir una resposta, d’aquestes variables n’hi ha algunes que no tenen una gran influència en el resultat final. Així doncs, s’ha decidit fixar variables amb poca influència (i.e. la emissivitat) i canviar aquelles que poden mostrar canvis realment importants en la resposta del experiment (i.e. malla; [6.2.1. Malla](#)).

Els sensors que s’han decidit estudiar són els següents: TB1, TB2, TB3, TS (de temperatura) i RAD91, RAD92 i RAD94R (de radiació). El sensor TK s’ha desestimat degut als valors erronis que s’extreien dels experiments de Gómez [1] i el sensor RAD92T degut a la seva proximitat amb el sensor RAD94R.

6.1. Assumpcions prèvies

Al model de foc en FLACS hi ha l’oportunitat d’introduir les regions d’ignició (“*Ignition Region*”) i regió de combustible (“*Fuel Region*”). En el cas de la regió del combustible, es va determinar que en combustibles volàtils (com és el cas del propà) no era necessària l’ús de la mateixa. Ja que tot el combustible expulsat a l’atmosfera és considerat que reacciona, i per això no és necessari fixar cap regió en concret. En el cas de la regió d’ignició, el cas era semblant, però ara el simulador sí que necessitava una certa regió per tal de produir la flama. La regió d’ignició és aquella zona on el simulador interpreta que es pot donar la combustió, li és indiferent si la regió

és molt gran o molt petita. D'altra banda, la regió del combustible es defineix com la zona on el combustible passa a estar en estat gasós, en els compostos volàtils no és necessari l'ús de la mateixa.

En el cas de la variable del vent hi havia una gran dificultat en saber com implementar-la. En el capítol [4.1. Tesi doctoral “Estudio experimental y modelización matemática de dardos de fuego”](#) es mostra una taula ([Taula 7](#)) amb els diferents experiments realitzats per l'autora, i els valors de les variables mesurades. En el cas del vent, només els experiments JFP-006-08 (3,5 m/s), JFP-006-07 (1,9 m/s), JFP-006-02 (1,25 m/s) i JFP-006-03 (0 m/s) mostraven el valor de la velocitat del vent. En els altres experiments, aquesta no havia estat mesurada però quan s'avaluaven les gravacions es podia apreciar que en algunes la velocitat no era nul·la. Aleshores, es van analitzar les gravacions dels experiments i es va determinar que es podia treballar negligint l'efecte del vent, ja que aquest només afectava al punt més alt de la flama on no hi havia sensors instal·lats.

A continuació es mostra un conjunt d'imatges referents al experiment JFP-006-08 (velocitat del vent més elevada, pitjor cas) on es pot apreciar com els sensors es veuen exposats en tot moment a l'efecte de la flama (Figura17, Figura18 i Figura19). El problema principal d'implementar el vent amb el simulador és que només és possible introduir la direcció (també desconeguda) i no l'efecte axial en el doll de foc. La solució de negligir l'efecte del vent es va prendre per poder continuar amb l'estudi de la millor manera possible, però és evident que la variable del vent és fortament rellevant amb paràmetres tals com la turbulència, combustió i radiació.

El següent conjunt d'imatges mostra el doll de foc de l'experiment JFP-006-08. D'esquerra a dreta es mostren en funció del temps.

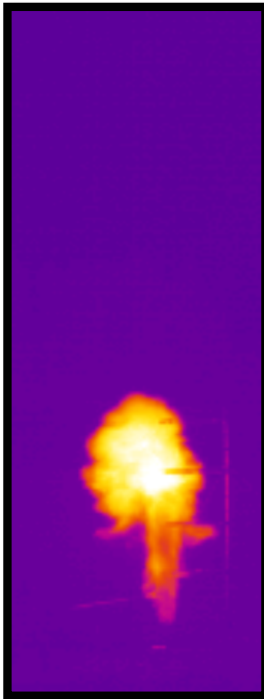


Figura 15: 1-JFP-006-08

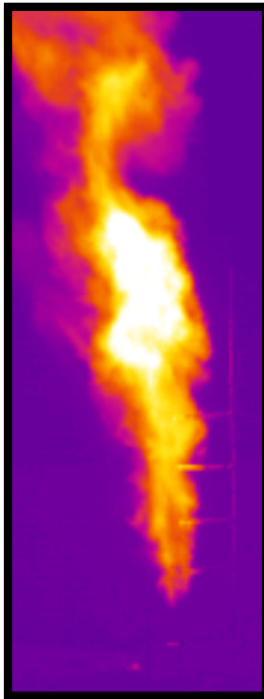


Figura 16: 2-JFP-006-08

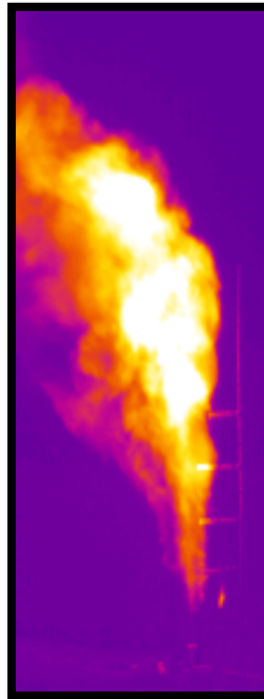


Figura 17: 3-JFP-006-08

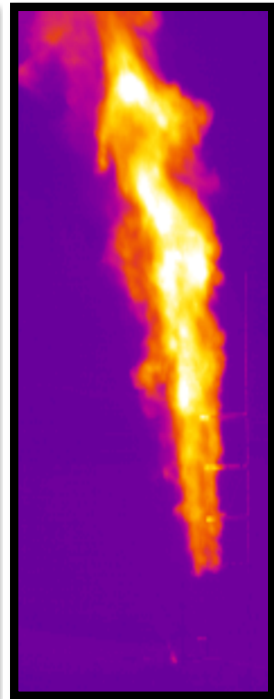


Figura 18: 4-JFP-006-08

L'estudi es va dur a terme mitjançant l'experiment JFP-006-08, ja que contenia els següents punts a favor:

- 1- Contenia el valor de totes les variables necessàries.
- 2- El rang del cabal del estudi JFP-006-08 és menor que els altres experiments.
- 3- La velocitat de sortida és subsònica.
- 4- El diàmetre de sortida és gran, i això en facilita la simulació pel que fa a la mida de la malla.

En el capítol [5.5. Model de doll en FLACS](#), s'ha explicat detalladament com es poden implementar els dolls sònics i subsònics en FLACS. Per tal de determinar si un experiment és sònic o subsònic es pot utilitzar l'equació 9 (quan es compleix l'assumpció, el fenomen és considerat sònic):

$$\frac{p_{cont}}{p_o} < \left[\frac{2}{\gamma + 1} \right]^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad eq. (9)$$

Segons Gómez [1] el coeficient de dilatació adiabàtic (γ) per al propà és de 1,123, i perquè el doll sigui considerat sònic la pressió mínima de sortida ha de ser de 1,74 bar. A partir d'aquest valor, considerant 1 atm (101.325 Pa) per la pressió ambient, i considerant els valors mesurats per el sensor de pressió a la sortida del doll, es pot saber quins dolls són sònics i quins són subsònics. La següent taula mostra un resum dels valors calculats.

Taula 11: Condició de sortida dels experiments. Pressió calculada en bars i el cabal en kg·s⁻¹.

Experiment	Pressió calculada	Cabal calculat	Condició (velocitat)
JFP-006-03	1,54	0,34	<u>Subsònica</u>
JFP-006-08	1,29	0,47	<u>Subsònica</u>
JFP-006-07	3,29	1,70	Sònica
JFP-006-02	3,69	1,45	Sònica
JFP-005-05	4,21	1,70	Sònica
JFP-005-04	4,74	1,91	Sònica
JFP-005-011	2,93	1,16	Sònica
JFP-005-012	4,02	1,61	Sònica
JFP-005-08	4,01	1,62	Sònica
JFP-005-03	1,16	0,87	<u>Subsònica</u>

Per calcular el cabal s'ha utilitzat les equacions 22 i 23 presentades a continuació. Els càlculs en cada instant de temps de tots els experiments, es poden veure en l'[Annex](#) del present treball.

$$m = C_d \cdot \psi \cdot A_1 \cdot P_{cont} \cdot \sqrt{\gamma \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \cdot \frac{M}{Z \cdot T_{cont} \cdot R \cdot 10^3}} \quad eq. (22)$$

$$\psi^2 = \frac{2}{\gamma - 1} \cdot \left(\left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \cdot \left(\frac{P_o}{P_{cont}}\right)^{\frac{2}{\gamma}} \cdot \left(1 - \left(\frac{P_o}{P_{cont}}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right) \right) \quad eq. (23)$$

On: P_{cont} : pressió continguda [Pa]

P_o : pressió atmosfèrica [Pa]

γ : coeficient de dilatació adiabàtic, relació $\frac{c_p}{c_v}$ s'estima 1,123

T_{cont} : temperatura continguda [K]

R: constant dels gasos ideals; 8,314 [KJ/kmol·K]

M: massa molar del combustible [kg/kmol]

\dot{m} : cabal del combustible [kg·s⁻¹]

C_d : coeficient de fregament, s'estima $C_d=1$ per situació més desfavorable

A_1 : àrea del orifici del combustible [m²]

Z: factor de compressibilitat del gas a P_{cont} i T_{cont} (per a gasos ideals Z=1)

ψ : per a dolls sònics s'estima directament $\psi=1$

Així doncs, es va establir que els experiments en els quals es realitzaria l'anàlisi eren el JFP-006-08, JFP-006-03 i JFP-005-03 (únics amb condició de velocitat subsònica), ja que la implementació del càlcul dels resultats a partir del “*Jet Utility Program*” ([5.5.2. Model de doll per velocitats sòniques](#)) era totalment inviable degut a les limitacions de temps d'aquest treball. A Gómez [3], s'especificava en cada simulació que el cabal oscil·lava en valors força distants. S'entén que el flux de combustible no era constant, però el simulador treballa amb una hipòtesi ([5.5.1 Model de doll per velocitats subsòniques](#)) que estima que el flux de sortida és constant. Així doncs, es va pensar en determinar el cabal mitjà per cada simulació per tal d'assimilar-lo a la realitat.

6.2. Anàlisi exploratòria

6.2.1. Malla

Per implementar la malla en FLACS, hi ha dues opcions disponibles que el programa ofereix per dissenyar l'escenari.

-“*Core domain*”: és la regió total on es pot implementar la malla (des de el punt mínim fins al punt màxim), es pot utilitzar la funció de cel·les uniformes (“*Uniform grid*”) de tal forma que mantindrà la mida de les cel·les iguals en totes les direccions. D'altra banda, si es desactiva aquesta opció és possible canviar la mida de les cel·les (“*Cell size*”) en funció a la seva direcció en els eixos de coordenades. Finalment, hi ha una tercera opció (“*Number of cells*”) que dóna la possibilitat de triar el nombre de cel·les en cada direcció, en front a triar la mida de les cel·les. El “*Max Aspect Ratio*” dóna la relació màxima entre la cel·les més petites i les cel·les més grans en tot el “*Core domain*”, quan la relació és 1, totes les cel·les tindran la mateixa mida, si la relació augmenta, hi haurà més cel·les petites que cel·les grans.

-“*Stretched domain*”: és la regió on es vol implementar una malla més petita per tal d’obtenir resultats més acurats.

-“*Refined grid*”: és una opció que hi ha disponible per acotar el càlcul del simulador en zones molt rellevants. Per exemple, està disponible en la zona de la fuga del combustible. Quan l’“*Stretched domain*” és molt petit ja fa la funció de malla refinada (“*Refined grid*”).

A continuació es mostren dues imatges per tal de facilitar la comprensió del disseny de malla en FLACS.

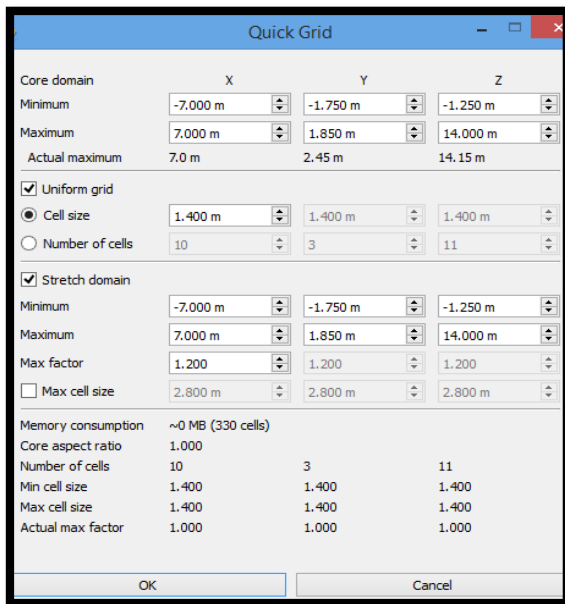


Figura 19: Opcions del disseny de la malla en FLACS (v.10.5)

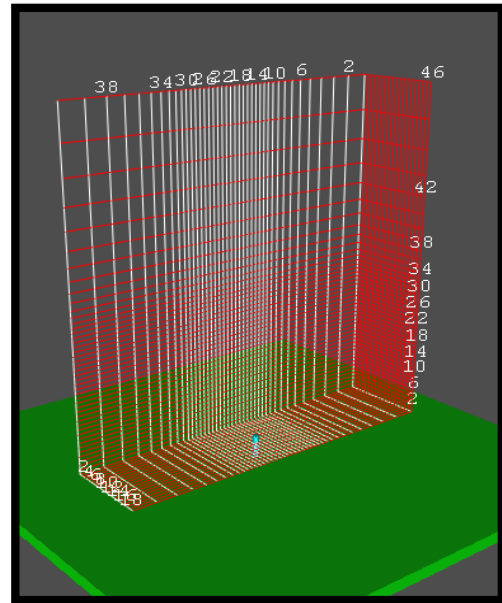


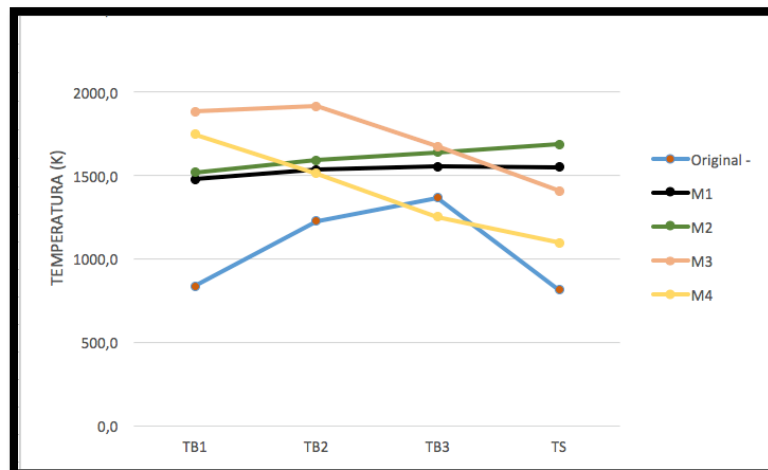
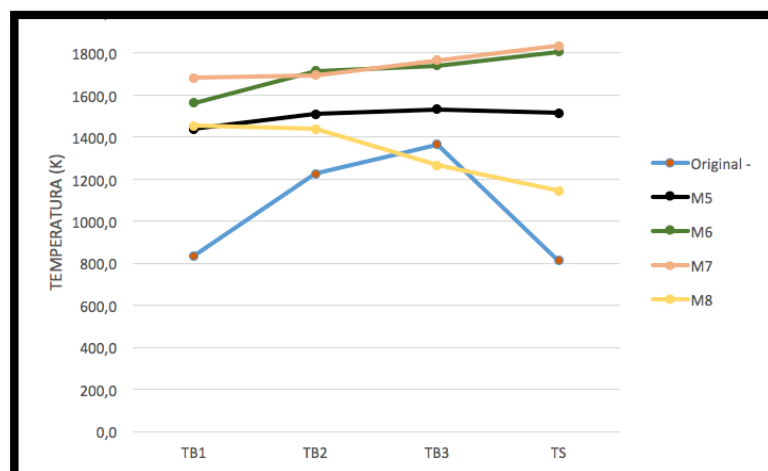
Figura 20: Il·lustració de la malla utilitzada en experiments de doll de foc

A continuació es descriuen els resultats de dues col·leccions de simulacions amb diferents configuracions de malles. Totes aquestes han simulat l’experiment JFP-006-08, el qual es caracteritza per tenir un diàmetre de sortida de l’orifici de 43,1 mm i una emissivitat de 0,3 (emissivitat representativa en els dolls de propà segons els estudis de Palacios i Casal (Palacios Muñoz, and Casal 2009)). A més el DTM, l’EDC i FOX van ser els models de radiació, combustió i de sutges utilitzats, respectivament. A la Taula 11 es descriuen les simulacions realitzades amb dues configuracions de malles diferents (de 0,05 fins a 0,2 m) en funció de dos cabals diferents (0,2 i 0,3 $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$). Els cabals utilitzats es van escollir degut a que eren dos valors pròxims al rang del experiment mesurat (0,47 a 0,5 $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$). Es van escollir els models DTM, EDC i FOX degut a que són els models utilitzats per els autors anteriors.

Taula 12: El cabal es mesura en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i la malla en metres.

Simulació	Cabal	Malla
M1	0,2	0,05 x 0,05x 0,05
M2	0,2	0,1 x 0,1 x 0,1
M3	0,2	0,14 x 0,14 x 0,14
M4	0,2	0,2 x 0,2 x 0,2
M5	0,3	0,05 x 0,05x 0,05
M6	0,3	0,1 x 0,1 x 0,1
M7	0,3	0,14 x 0,14 x 0,14
M8	0,3	0,2 x 0,2 x 0,2

A continuació es mostren les gràfiques 1 i 2 que representen els resultats de temperatura de les simulacions mostrades en la taula 12. En la llegenda es pot apreciar els valors experimentals (Original) i els valors de les simulacions descrites en la taula 12. Les gràfiques s'han desenvolupat en l'instant de temps (10 de 20 segons totals) on les simulacions estaven en règim estacionari. L'eix d'abscisses representa el sensor i l'eix d'ordenades el valor de la temperatura (mitjana).

**Gràfica 1: Estudi dels sensors de temperatura en M1, M2, M3 i M4.****Gràfica 2: Estudi dels sensors de temperatura en M5, M6, M7 i M8.**

Les gràfiques anteriors (gràfica 1 i 2) serveixen per entendre el comportament de cada simulació en front els resultats experimentals. Els colors s'han definit per grandària de malla:

-Negre: Malla de 0,05.

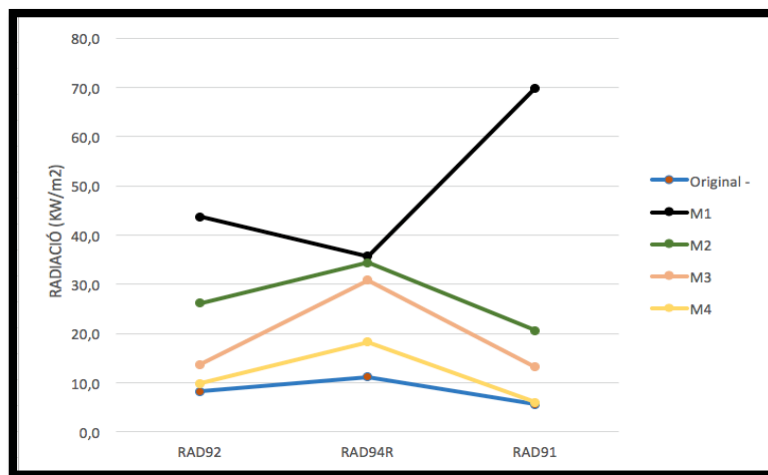
-Taronja: Malla de 0,14.

-Verd: Malla de 0,1.

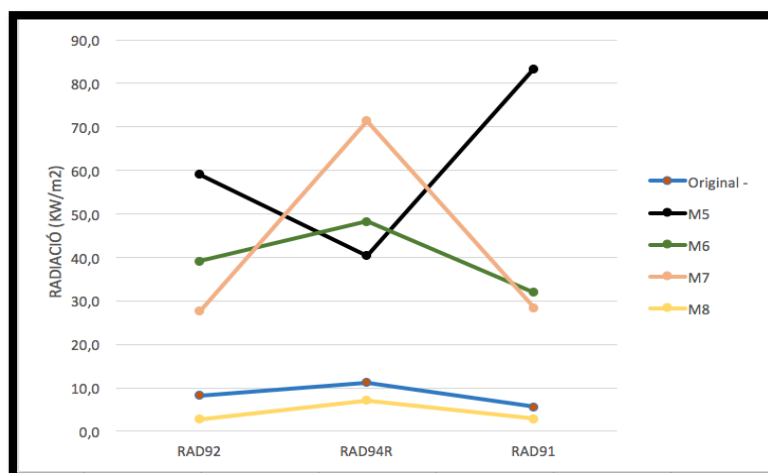
-Groc: Malla de 0,2.

Estudiant les gràfiques a partir de la línia cromàtica, es pot entendre que les malles de 0,05 (color negre) i de 0,2 (color groc) presenten resultats més pròxims a la resposta (Original). D'altra banda, els resultats no mostren una tendència clara i resolutiva. Per aquest motiu es procedeix amb l'anàlisi dels sensors de radiació. També és important estudiar els gràfics que mostren el post processador de FLACS per apreciar la geometria de la flama i la seva evolució, s'estudiarà posteriorment als sensors de radiació.

Es presenta les gràfiques del anàlisi dels sensors de radiació, la nomenclatura de la llegenda és la mateixa que en el cas anterior, això si, ara els valors del l'eix d'ordenades reflecteixen la radiació.



Gràfica 3: Estudi dels sensors de radiació en les simulacions M1, M2, M3 i M4.



Gràfica 4: Estudi dels sensors de radiació en les simulacions M5, M6, M7 i M8.

Els sensors de radiació donen a entendre que les millors simulacions són M4 i M8 (línies grogues, malles de 0,2). En contraposició el que s'exposava en el capítol 3 ([3.4. Conclusions dels autors estudiats](#)), les malles que donen resultats més prometedors són les més grans.

A continuació es mostra les figures (Figura 22, 23, 24 i 24) que s'obtenen amb el post-processat de FLACS. Es representarà la simulació M4 (bons resultats en temperatura i radiació però malla de 0,2 m) i la simulació M5 (mal resultat en radiació utilitzant una malla de 0,05 m).

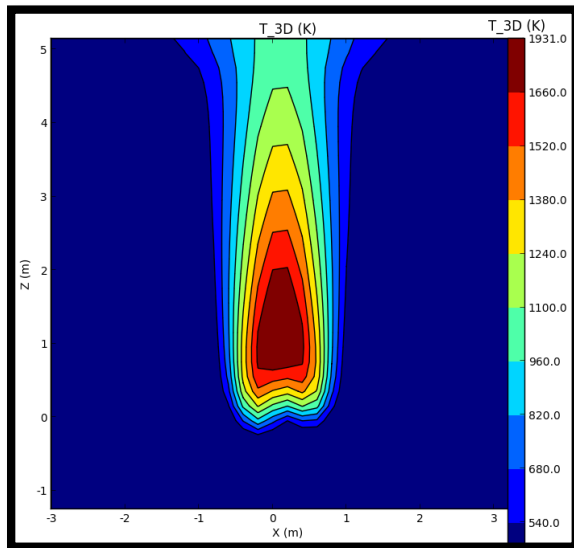


Figura 21: Representació del perfil de temperatures en la simulació M4.

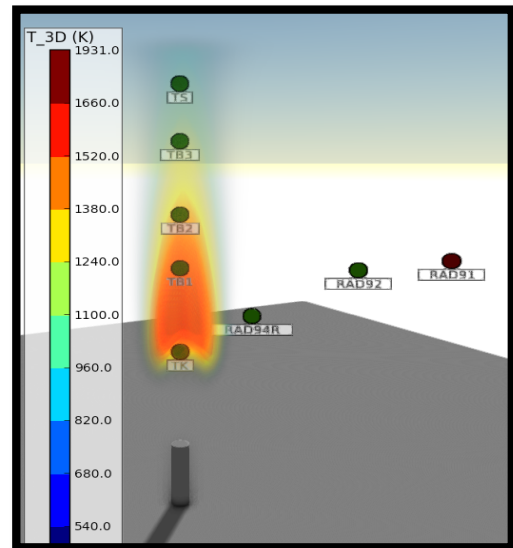


Figura 22: Representació tri-dimensional de temperatura de la simulació M4.

És molt rellevant la forma geomètrica que el programa interpreta del fenomen, ja que els dolls de foc es caracteritzen per tenir una forma més el·líptica i no tan quadrada en el seu perfil de temperatura.

A continuació es mostren les representacions de la simulació M5 en FLACS.

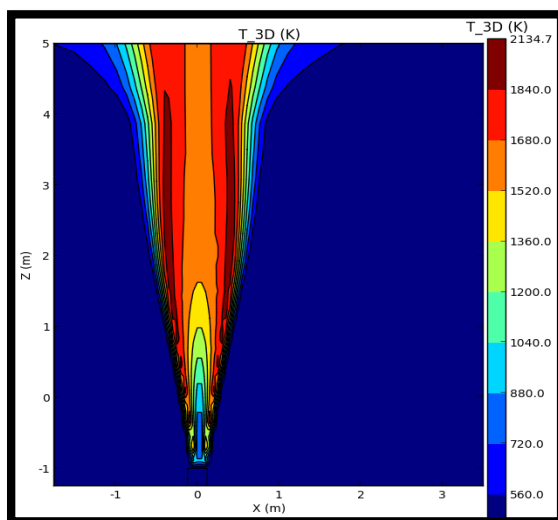


Figura 23: Representació del perfil de temperatures en la simulació M5.

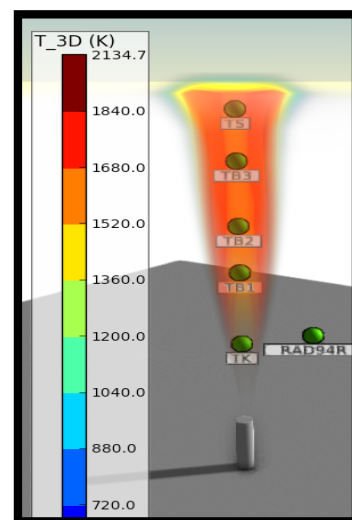


Figura 24: Representació tri-dimensional de temperatura de la simulació M5.

En aquest cas, la interpretació del programa a l'hora de representar la geometria del fenomen si que s'assimila més a la realitat. Es pot apreciar com la forma del perfil de temperatura tendeix a ser més el·líptica i no tan quadrada.

Les conclusions d'aquest apartat es resumeixen en els següents punts.

Estudi dels sensors de temperatura:

1- El sensor TB1 (1,82 m) mostra una tendència molt desfavorable en front de la resposta. No hi ha cap simulació que s'aproximi als valors empírics. Els valors mostrats són sobreestimats als valors de l'experiment empíric.

2- El sensor TB2 (2,65 m axialment) mostra uns resultats més pròxims en front a la tendència del sensor anterior. Novament, els valors mostrats són sobreestimats als valors de l'experiment empíric.

3- El sensor TB3 (3,66 m axialment) mostra uns resultats força pròxims en les simulacions que el cabal de sortida és de $0,2 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$.

4- El sensor TS (4,46 m axialment) mostra uns resultats molt allunyats de la resposta. Podria ser degut a l'efecte del vent, aquest s'apreciava que podia tenir un comportament més rellevant en les parts més elevades de la flama. Per això, els resultats dels sensor TS tendeixen a ser menors que els altres (no és el cas dels simulats degut a que no hi ha influència del vent).

5- Mantenint el sensor TS allunyat dels resultats que es poden esperar, les simulacions que mostren una tendència similar al comportament empíric són M1, M2, M5 i M6 (simulacions amb malla més petita). Curiosament, són les que mostren els resultats més allunyats de temperatura i sobretot, de radiació.

Estudi dels sensors de radiació:

1- La majoria de les simulacions de $0,2 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ mostren una tendència similar als resultats empírics. En el cas de les simulacions de $0,3 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$, la tendència és similar però la diferència és més elevada. Aquest fet, pot ser degut a que en les simulacions de $0,3 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ hi hagi més radiació emesa, i en conseqüència més radiació captada en els sensors.

2- Destaquen les simulacions M1 i M5, per mostrar uns resultats molt desfavorables en front de la resposta. La seva tendència tampoc s'assimila a la realitat. Les simulacions M4 i M8 presenten bones aproximacions a la realitat, però el perfil de temperatura no sembla ser correcte.

Conclusions finals de l'apartat 6.1.1.

1- Els resultats del sensor TS es poden descartar degut al efecte del vent ja explicat.

2- La tendència dels resultats dels sensors de temperatura donen a entendre que les simulacions amb malla de 0,2 (M4 i M8) s'haurien de descartar (tot i que donen aproximacions molt bones en radiació).

3- La tendència dels resultats dels sensors de radiació, donen a entendre que les simulacions amb malla de 0,05 (M1 i M5) s'haurien de descartar (tot i que donen bones aproximacions en temperatura).

4- Finalment, degut a les explicacions anteriors, les simulacions més prometedores són: M2, M3, M6 i M7 (malles relativament petites amb bons perfils de temperatura).

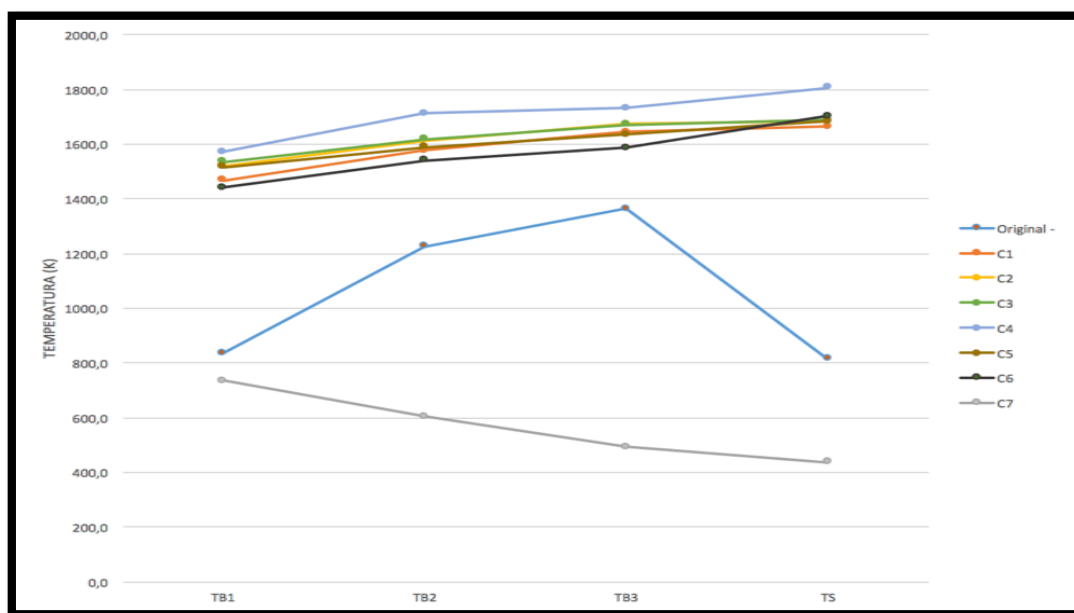
6.2.2. Cabal

Tot i que es pot saber el cabal utilitzat per Gómez [1], capítol [6.1. Assumpcions prèvies](#), és important entendre el comportament del simulador per tal de verificar el seu funcionament amb l'ús de les diferents variables.

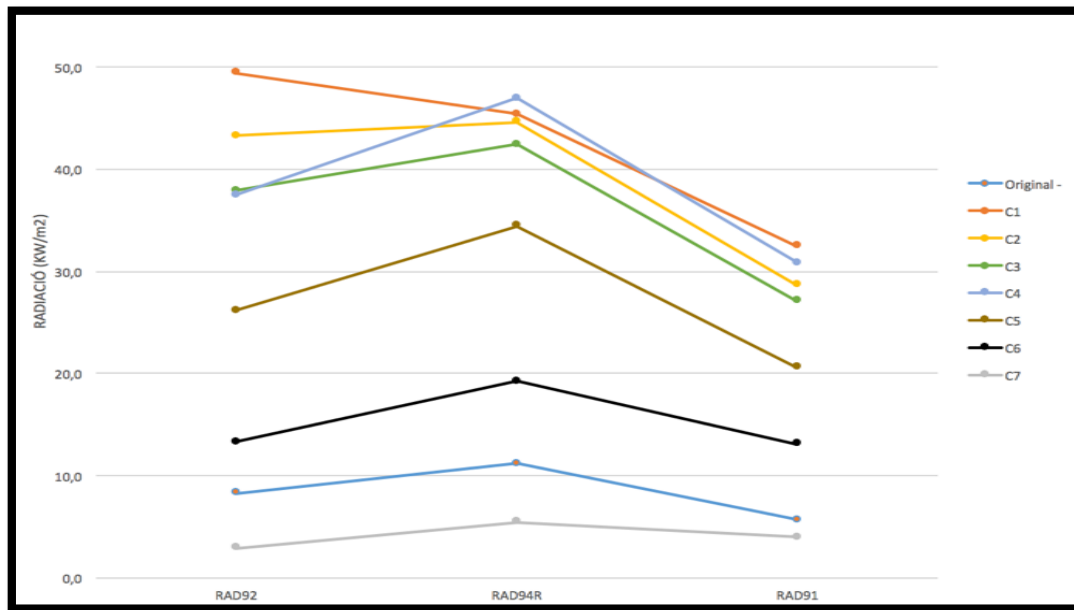
A la Taula 13 es descriuen les simulacions realitzades amb set cabals diferents (de 0,01 fins a 0,54 $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$) amb malles de 0,1 m (la configuració de 0,1 m ve justificat per [3.4. Conclusions dels autors estudiats](#)).

Taula 13: Simulacions per comprovar el model de combustió. El cabal està en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i la malla en m.

Simulació	Cabal	Malla
C1	0,54	0,1 x 0,1 x 0,1
C2	0,4	0,1 x 0,1 x 0,1
C3	0,3	0,1 x 0,1 x 0,1
C4	0,275	0,1 x 0,1 x 0,1
C5	0,2	0,1 x 0,1 x 0,1
C6	0,1	0,1 x 0,1 x 0,1
C7	0,01	0,1 x 0,1 x 0,1



Gràfica 5: Estudi dels sensors de temperatura en la sèrie C. Temperatura en K.



Gràfica 6: Estudi dels sensors de radiació en la sèrie C. Radiació en KW/m2.

Pel que fa a la sensibilitat de la temperatura (mitjana) per diferents valors de cabals, es pot apreciar que tots els resultats són força similars (tret de la simulació C7). Això dona a entendre que en una malla de 0,1 m la influència del cabal a l'hora de mesurar la temperatura no és massa gran. D'altra banda, quan es disposa de cabals petits com en la simulació C7 (línia gris), els resultats dels sensors de temperatura són massa petits, ja que la quantitat de cabal introduït s'allunya totalment de la realitat del experiment. Això indica que un cabal inferior a $0,1 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ reproduceix simulacions de torxes i no de jets tal i com es pot veure en la següent Figura 25.

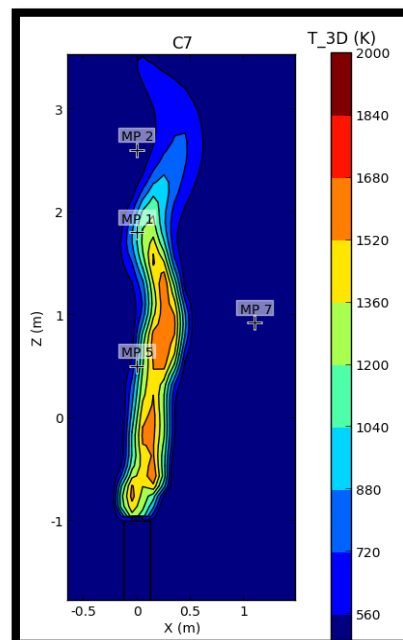


Figura 25: Perfil de temperatures 2D de la simulació C7.

A diferència de les temperatures, els valors de radiació mesurats (valor mitjà) es caracteritzen per tenir variacions considerables segons el cabal de sortida.

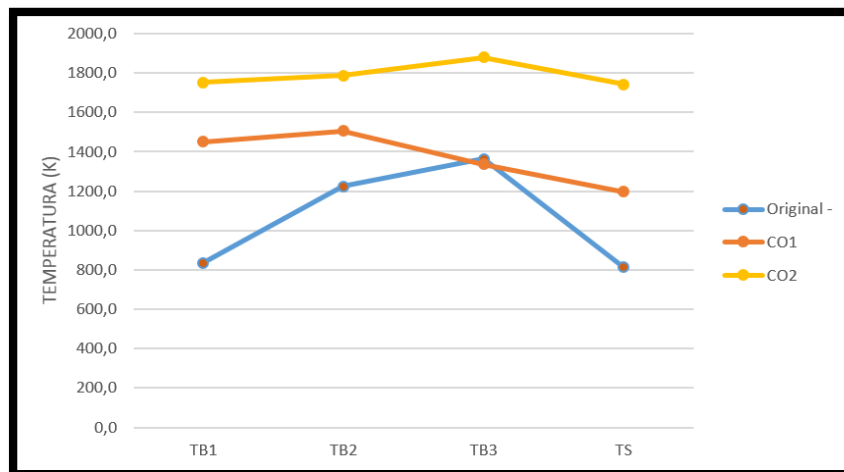
6.2.3. Combustió

En l'apartat [5.1. Model de combustió en FLACS](#) s'ha parlat de la problemàtica d'utilitzar el model MIB “*Per flames amb poca turbulència o nul·la és possible utilitzar el model “Mixed Is Burn” (MIB), el problema de simular flames amb poca turbulència és que el simulador pot tenir dificultats i la flama pot autoextingir-se [10]*”. Per tal de comprovar la veracitat del model, s'ha comprovat com evoluciona aquest, i si els resultats es mostren coherents amb la problemàtica descrita anteriorment. En la Taula 14 es descriuen les simulacions que s'han dut a terme per avaluar la funcionalitat dels dos models de combustió. Aquestes s'han fet amb una malla de 0,2 m (menys temps de simulació de FLACS) i un cabal de $0,275 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$.

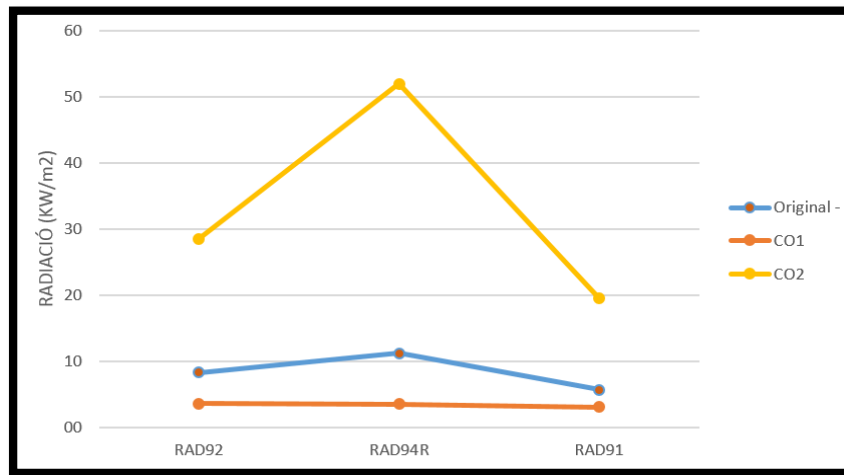
Taula 14: Simulacions per comprovar el model de combustió. El cabal està en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i la malla en m.

Simulació	Cabal	Malla	Model de Combustió
CO1	0,275	0,2 x 0,2 x 0,2	EDC
CO2	0,275	0,2 x 0,2 x 0,2	MIB

A continuació es mostren les gràfiques 7 i 8 amb els resultats dels sensors de radiació i temperatura en front els valors empírics. Els valors de la radiació fan referència a valors mitjans de les simulacions. La nomenclatura dels eixos és la mateixa que en les gràfiques anteriors.



Gràfica 7 Estudi dels sensors de temperatura en K en la sèrie d'experiments CO.



Gràfica 8: Estudi dels sensors de radiació en KW·m2 en la sèrie d'experiments CO.

Les dues gràfiques presentades mostren que els autors com Pedersen [2] tenien raó en front al millor model de combustió de FLACS. S'aprecia fàcilment com la simulació CO1 (EDC) aproxima millor els resultats dels sensors de temperatura i radiació. Tot i això, s'aprecia com la tendència (comportament semblant al experiment empíric) que mostren els resultats de la simulació MIB s'aproxima notablement als resultats originals. És possible que el simulador interpreti que el fenomen té poca turbulència, i per això mostra resultats amb tendència similar.

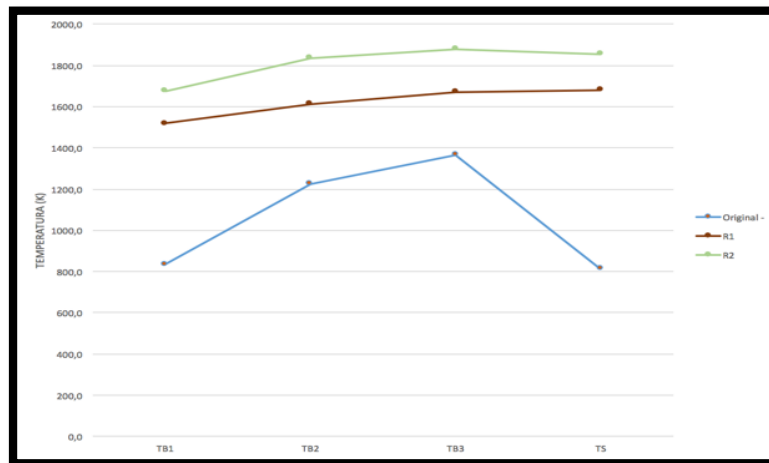
És curiós com els resultats de la simulació CO1 són menors que els resultats experimentals, pel que fa a la radiació. En el capítol [6.2.1. Malla](#), s'havien estudiat diversos escenaris, en el que destaca la simulació M4 ($0,2 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ i $0,2 \text{ m}$ de malla) per tenir condicions similars al CO1 ($0,275 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ i $0,2 \text{ m}$ de malla). En aquell cas, els resultats es sobreestimaven en front els valors experimentals, en aquest cas el cabal utilitzat és superior i en conseqüència, s'esperaria que presentés una radiació més elevada. En conclusió, el simulador mostra oscil·lacions en els seus resultats quan es varien certs valors i és difícil de treure patrons de comportament.

6.2.5. Radiació

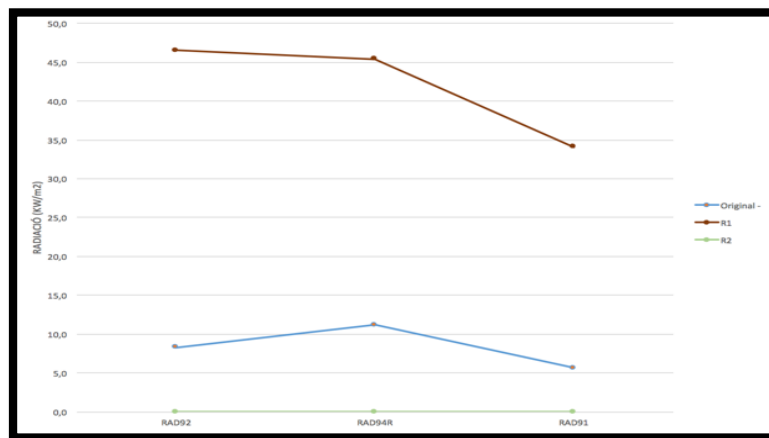
A continuació es presenta la taula 15, on s'indiquen els paràmetres que caracteritza cada simulació amb l'objectiu de comprovar la funcionalitat del model de radiació. Seguidament dues gràfiques (gràfica 9 i gràfica 10) que il·lustren els resultats de les dues simulacions dutes a terme.

Taula 15: Simulacions per comprovar el model de radiació. El cabal està en $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ i la malla en m.

Simulació	Cabal	Malla	Model de radiació
R1	0,4	$0,1 \times 0,1 \times 0,1$	DTM
R2	0,4	$0,1 \times 0,1 \times 0,1$	Six-Flux



Gràfica 9: Estudi dels sensors de temperatura en K en la sèrie d'experiments R.



Gràfica 10: Estudi dels sensors de radiació en KW·m2 en la sèrie d'experiments R.

En termes de radiació, destaca la simulació R2 on els resultats són nuls (taula 17). Per tal de veure si l'error resideix en el model o realment fa una millor aproximació, es presenta els resultats dels sensors de temperatura (Taula 16, Gràfica 9). S'aprecia que les dues simulacions presenten valors de temperatures similars. D'aquesta forma, es pot afirmar que el model DTM representa amb major fidelitat els incendis de dolls de foc.

Taula 16: Resultats dels sensors de temperatura de la sèrie R. Temperatura en K.

Simulació	TB1	TB2	TB3	TS
Original	836,6	1.225,4	1.364,6	814
<i>R1</i>	1.519,0	1.611,4	1.669,9	1.679,5
<i>R2</i>	1.675,1	1.835,4	1.878,8	1.855,3

Taula 17: Resultats dels sensors de radiació de la sèrie R. Radiació en KW/m².

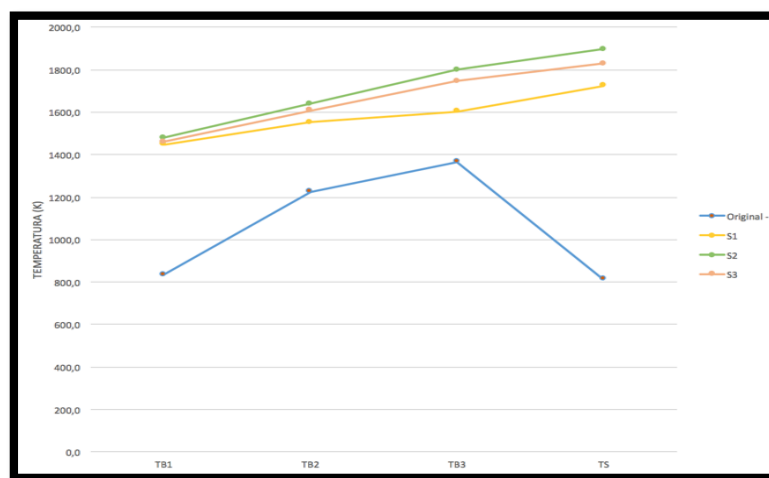
Simulació	RAD92	RAD94R	RAD91
Original	8,2	11,1	5,6
<i>R1</i>	46,5	45,4	34,1
<i>R2</i>	0	0	0

6.2.3. Sutge

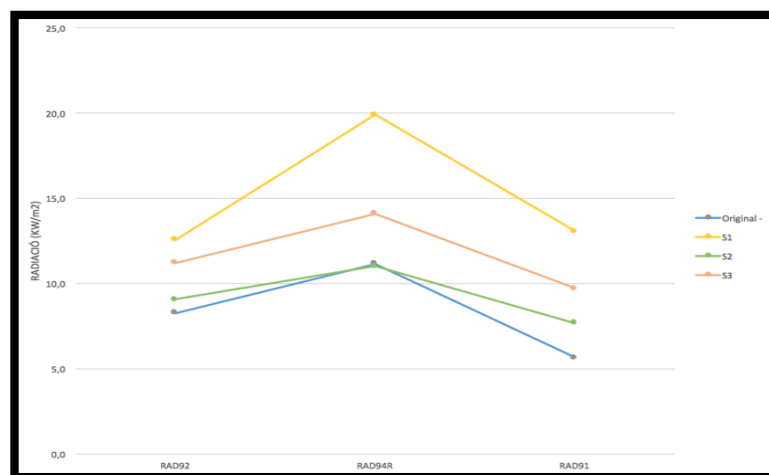
Per tal de analitzar la influència dels diferents models de sutge, es presenten tres simulacions diferents. Seguidament es mostren dues gràfiques que il·lustren els resultats dels sensors de temperatura i radiació.

Taula 18: Simulacions per comprovar el model de sutge. El cabal està en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ i la malla en m.

Simulació	Cabal	Malla	Model de Sutge
S1	0,1	0,1 x 0,1 x 0,1	FOX
S2	0,1	0,1 x 0,1 x 0,1	"None"
S3	0,1	0,1 x 0,1 x 0,1	FCF (1%)



Gràfica 11: Estudi dels sensors de temperatura en K en la sèrie d'experiments S.



Gràfica 12: Estudi dels sensors de radiació en KW/m2 en la sèrie d'experiments S.

Per analitzar la funcionalitat del model del sutge, podem apreciar la gràfica 11 on es presenten diferències significatives en els sensors TB2 i TB3. Com ja s'havia mencionat anteriorment, el sensor TS és sensible a ser analitzar degut a la casuística del vent. Destaca S2 (escenari sense

model de sutge) on la temperatura mesurada és superior. Si s'estudien les dues gràfiques, s'aprecia com les simulacions que mostren una temperatura superior a la gràfica 11 mostren una radiació inferior en la gràfica 12. La explicació és la següent, els sensors de temperatura resideixen en l'eix axial de la flama, i la formació de sutge s'experimenta en els voltants de la flama. La formació de sutge ha de tenir una influència directa en la reacció de combustió i en la temperatura de la flama, si el sutge és format la reacció a la que dona lloc és incompleta i la temperatura màxima a la que pot arribar és inferior a la d'una reacció completa (per tant, quan s'introdueix el model de sutge les temperatures de la flama són menors). Seguint amb el patró descrit, la simulació S3 (FCF al 1%) genera una quantitat menor de sutge que S1 (FOX), i per això la temperatura mesurada és major.

Si ens centrem en els sensors de radiació, la explicació continua sent la mateixa que en el paràgraf anterior. Les partícules de sutge incandescent es situen al voltant de la flama i no en el seu eix vertical. De tal manera, que la influència dels sensors de radiació (situats radialment) és molt més gran (el simulador calcula l'emissivitat del model tenint en compte que el sutge format es comporta com un cos gris, i en resultat, una emissivitat major degut a la constant de Stefan-Boltzmann). La influència del sutge, que absorbeix calor i en desprèn, és altament rellevant en la radiació emesa, en conseqüència la simulació S1 (model FOX) que forma més sutge és la que presenta majors valors de radiació.

Finalment, cal destacar que aquest capítol no tenia l'objectiu de veure quina simulació s'aproximava més a la realitat, degut a que el cabal utilitzat no és fidel al que es va utilitzar en els experiments empírics. D'altra banda, ha sigut útil per poder apreciar com funciona el model i la relació que manté el sutge amb els paràmetres de radiació i temperatura. És important destacar, que el model "none" no hauria de ser una alternativa a utilitzar degut a l'absència de sutge en l'escenari format. Paradoxalment, s'haurà d'estudiar en les simulacions finals degut a l'aproximació que presenta en els seus resultats. Els models FCF i FOX aproximen d'una manera similar, però el model FCF necessitaria un ampli estudi per poder saber quin percentatge de carboni del combustible és convertit en sutge en la realitat.

Taula 19: Resultats dels sensors de temperatura de la sèrie S. Temperatura en K.

Simulació	TB1	TB2	TB3	TS
Original	836,6	1.225,5	1.364,7	814
S1	1.448	1.551,2	1.601,8	1.723,5
S2	1.478,7	1.638,4	1.798,5	1.896,6
S3	1.461,1	1.606,8	1.745,5	1.828

Taula 20: Resultats dels sensors de radiació de la sèrie S. Radiació en KW/m².

Simulació	RAD92	RAD94R	RAD91
Original	8,2	11,1	5,6
S1	12,5	19,90	13
S2	9	11	7,6
S3	11,2	14,09	9,7

6.2.4. Conclusions de l'anàlisi exploratòria

L'apartat anterior (6.2) tenia l'objectiu d'analitzar les diferents variables per tal d'establir els millors criteris per realitzar les simulacions finals. Els models i especificacions que s'utilitzaran en les pròximes simulacions es poden resumir en la següent taula (només s'han mostrat els rellevants).

Taula 21: Resum de les assumpcions escollides per les simulacions finals.

Variable	Model/criteri escollit
Malla	0,1-refinada
Cabal	A partir del càlcul realitzat (Annex)
Model de combustió	EDC
Model de radiació	DTM
Model de sutge	FOX-“None”

A partir de l'anàlisi de cada variable es poden afirmar que:

- 1- És necessari aplicar una malla relativament petita per tal que el simulador interpreti el fenomen com un doll de foc i no com una torxa. D'altra banda, si la malla utilitzada és molt petita els resultats de radiació presenten una mala aproximació.
- 2- En termes de temperatura, utilitzant una malla coherent (de 0,1 m per exemple) els resultats es mostraran independents del cabal (sempre i quan no s'utilitzin valors molt extrems).
- 3- El model de combustió que resulta més útil és EDC i el model de radiació DTM.
- 4- El model de sutge planteja resultats difícils de ser analitzats, en principi les simulacions sense model de sutge haurien de presentar resultats molt desfavorables, però no es dona aquesta situació. Els models FOX i FCF presenten resultats similars, d'altra banda, s'hauria d'estudiar el model FCF per saber quin percentatge és el més idoni en el cas de propà.
- 5- S'ha demostrat que l'efecte de la emissivitat és nul en el model de doll de foc en FLACS.

6.3. Simulació de l'experiment JFP-006-08

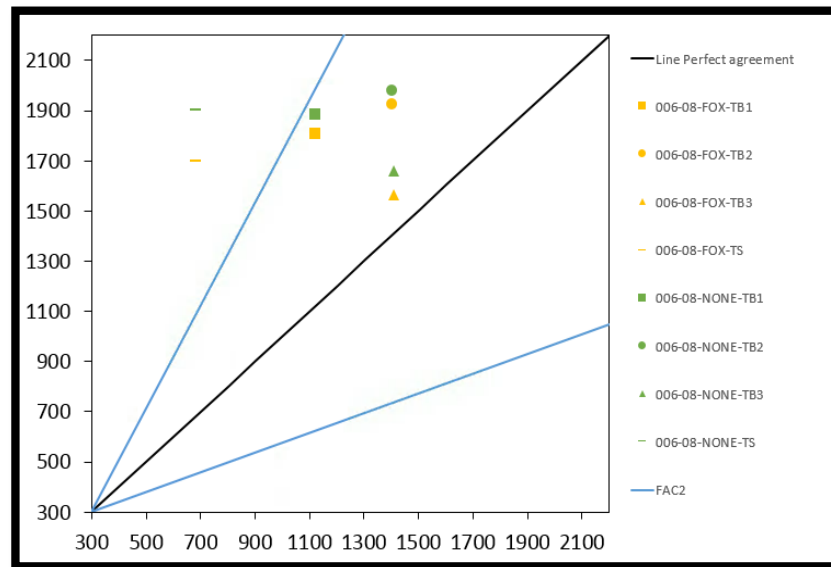
A continuació es presentaran les simulacions finals dels experiments realitzats, cal destacar que ara s'implementa vent, ja que és necessari intenta aproximar les simulacions a la realitat. En el capítol anterior, el principal objectiu era estudiar el comportament del simulador i per això, es va desestimar l'ús del vent degut a la problemàtica que mostrava. Així doncs, en l'experiment JFP-006-08 les condicions establertes han estat les següents:

Taula 22: Especificacions preses en l'experiment JFP-006-08. Diàmetre de sortida del doll en mm, la dimensió de la malla en m, el cabal del combustible en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$, la zona d'ignició en m^3 i el vent en m/s.

Variable	Especificació
Diàmetre de sortida del doll	43,1
Dimensió de la malla	0,1 uniforme
Cabal de combustible	0,54
Zona d'ignició	0,25x0,25x1
Model de combustió	EDC
Model de radiació	DTM
Model de sutge	FOX i "None"
Emissivitat	0,35
Vent	1,8

A continuació es mostren els resultats dels sensors de temperatura (valors mitjans dels sensors TB1, TB2, TB3 i TS) de les dues simulacions dissenyades (model de sutge FOX i sense model de sutge) per l'anàlisi final. En la gràfica es pot veure la llegenda que diferencia en color (el model de sutge) i en forma de marcador (el sensor de temperatura). Els valors experimentals es mostren en la línia diagonal ("*Line perfect agreement*"). Les línies blaves mostren les rectes FAC2, aquestes simulen el doble i la meitat, del valor experimental. Finalment, els valors dels eixos d'abscisses i ordenades mostren la temperatura en graus Kelvin i la radiació en KW/m^2 .

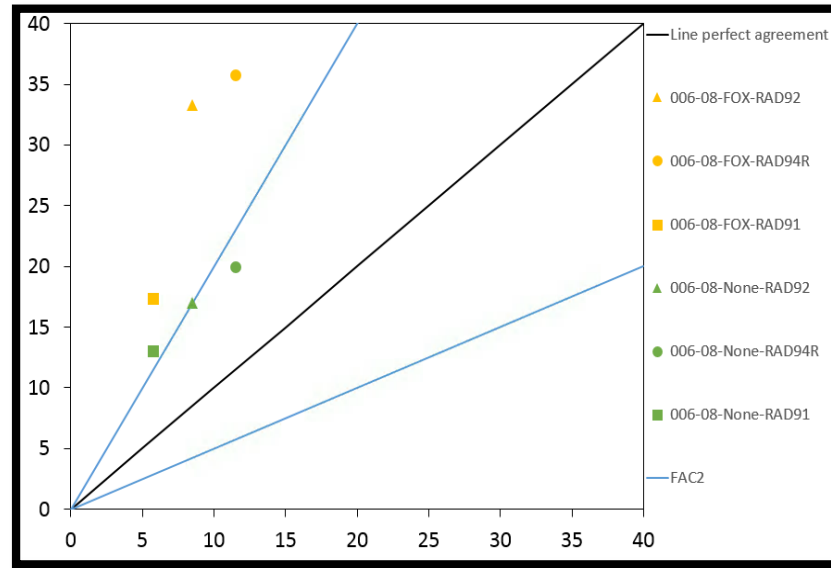
La nomenclatura explicada es mantindrà al llarg dels següents apartats 6.4 i 6.5.



Gràfica 13: Estudi dels sensors de temperatura de l'experiment JFP-006-08. La temperatura està en K.

La gràfica mostra una clara tendència; la millor aproximació resideix en l'escenari que presenta model de sutge (color ataronjat). D'altra banda, es pot apreciar com el sensor TB3 (triangle) mostra els millors resultats en aproximació a la realitat. El sensor TS (guió horitzontal) és el que mostra una desviació més gran (fora del límit del FAC2), en concordança amb les explicacions realitzades en el capítol anterior. Així doncs, es podria destacar que el simulador és capaç d'aproximar millor els resultats a mesura que s'augmenta la distància axial de la flama (el sensor TS es descarta degut a la gran influència del vent en els experiments realitzats per Gómez [1]). És possible, que el simulador FLACS tingui dificultats en simular la flama en les zones més pròximes al “*lift-off*” (com exposava l'autora Pedersen [2]) i per això, els millors resultats es mostren en punts més allunyats de la fuita.

A continuació, es mostren els resultats dels sensors de radiació.



Gràfica 14: Estudi dels sensors de radiació de l'experiment JFP-006-08. La radiació està en KW/m².

Paradoxalment, els resultats dels sensors de radiació es mostren contradictoris als resultats anteriors (exposats en la gràfica prèvia). És a dir, l'escenari amb model de sutge (ataronjat) mostra uns valors de temperatura millors a l'escenari contrari (verd), però en termes de radiació la situació és a la inversa (els valors verds són més pròxims a la resposta en vers als ataronjats). Es pot apreciar com només el sensor RAD91 supera el llinar del FAC2.

Lògicament, les flames que continguin una temperatura més elevada produiran una radiació més prominent, però el simulador interpreta el fenomen d'una altra forma. La millor explicació és la següent: en les simulacions on el model de sutge és inexistent, la combustió esdevé amb un model de radiació incomplet i el programa aproxima els resultats de la millor manera possible, i casualment, aproxima millor que en el model que conté un element determinant de la radiació.

Si s'analitzen els sensors individualment, es pot apreciar com en el model sense sutge els tres sensors mostren resultats similars. D'altra banda, en els escenaris amb FOX (ataronjat) els radiòmetres 92 i 94R (més pròxims) mostren pitjors resultats que el radiòmetre 91 (més allunyat). És possible que el simulador approximi millorar la radiació en zones més distants a la combustió (RAD1), ja que el disseny de la malla és uniforme en tots els punts i no pot ser objecte de rellevància en els resultats.

A continuació es procedirà en l'anàlisi dels resultats dels sensors de radiació i temperatura mitjançant el càlcul del “*Fractional Bias*”(FB) i del “*Normalized mean square error*” (NMSE).

$$FB = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 2 \frac{\bar{y}_m - \bar{y}_e}{\bar{y}_m + \bar{y}_e} \quad eq. (24)$$

$$NMSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_m^i - y_e^i)^2}{\bar{y}_m \bar{y}_e} \quad eq. (25)$$

On: n: nombre total d'instants (nombre de mostres).

\bar{y}_m o y_m^i : valor de la mostra en l'instant i.

\bar{y}_e o y_e^i : valor del experiment en l'instant i.

Els índexs s'han determinat utilitzant els diferents valors dels instants de temps en la simulació, en les gràfiques, es mostra una mitjana dels valors.

La següent taula mostra els resultats del càlculs dels dos índex estadístics mostrats (equació 24 i 25), les referències bibliogràfiques de les equacions es poden trobar en l'[annex](#) del present treball.

Taula 23: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-006-68 en la simulació amb model FOX.

SENSOR	FB	NMSE
TB1	0,52	0,65
TB2	0,43	0,36
TB3	0,29	0,22
TS	1,07	<u>2,63</u>
RAD92	1,04	<u>2,77</u>
RAD94R	0,97	<u>2,11</u>
RAD91	0,90	<u>1,85</u>

Taula 24: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-006-68 en la simulació sense model de sutge.

SENSOR	FB	NMSE
TB1	0,54	0,70
TB2	0,45	0,40
TB3	0,34	0,27
TS	1,12	<u>3,08</u>
RAD92	0,58	0,73
RAD94R	0,56	0,63
RAD91	0,68	0,98

Els índexs FB i NMSE indiquen proximitat al resultat quan aquests s'aproximen al valor de 0; en el cas del índex FB, els resultats negatius indiquen que els valors mesurats (simulats) han estat inferiors als experimentals i per valors positius, superiors als valors experimentals. La gran diferència entre l'índex FB i NMSE es troba en la mesura de l'error sistemàtic (FB i NMSE) i l'error no sistemàtic o aleatori (NMSE).

Destaca el sensor TS (en els dos escenaris per igual) per mostrar un índex NMSE el qual interpreta el resultats com no sistemàtics (degut a la poca proximitat; majors que 1).

Els sensors de radiació (escenari amb FOX), destaquen per mostrar uns resultats molt allunyats de la resposta (tal i com ja esperaven a partir del autor Osenbroch [14]), l'índex NSME també

interpreta tots els resultats com a no sistemàtics (majors que 1). En el cas del escenari sense model de sutge, tots els resultats (llevat del sensor TS) del índex NMSE destaquen per ser sistemàtics i sobrevalorats.

A continuació es mostren dues imatges de l'estudi del post processat en FLACS.

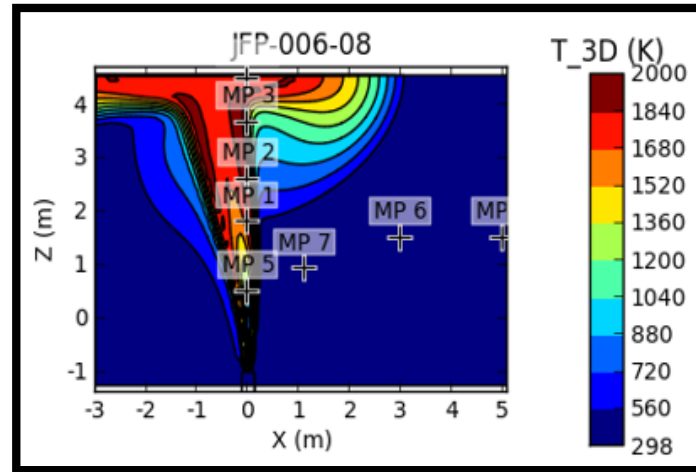


Figura 26: Il·lustració 2D del perfil de temperatures del experiment JFP-006-08.

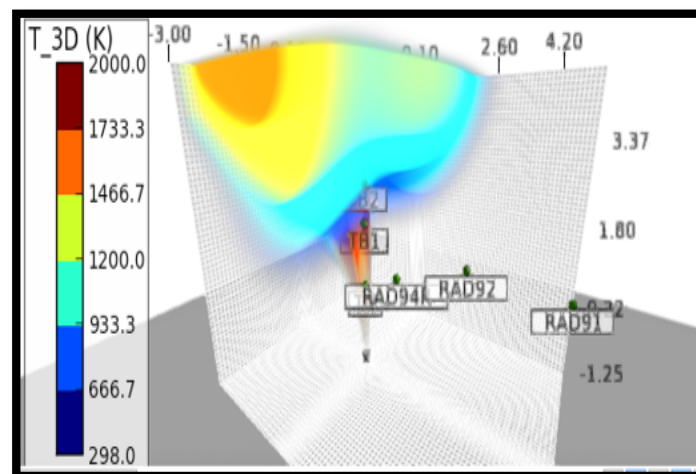


Figura 27: Il·lustració 3D del perfil de temperatures del experiment JFP-006-08.

La il·lustració 2D mostra la forma geomètrica que el simulador interpreta del fenomen de doll de foc ([6.2.1. Malla](#)), en aquest cas s'aprecia la representació el·líptica del fenomen. En el cas de la il·lustració 3D, destaca l'efecte del vent per produir turbulència en la zona superior al doll de foc. És degut a aquesta interpretació, que el sensor de temperatura TS destaca per mostrar resultats molt desfavorables. Seguidament, es mostraran les diferències entre les imatges reals i la interpretació del fenomen en el simulador.

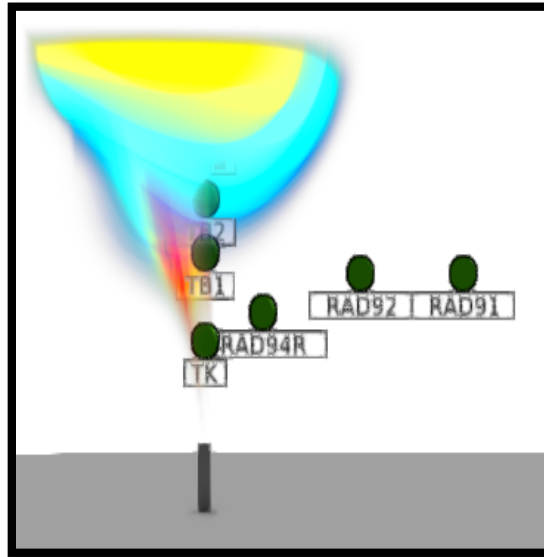


Figura 28: Il·lustració de la implementació del vent en FLACS.

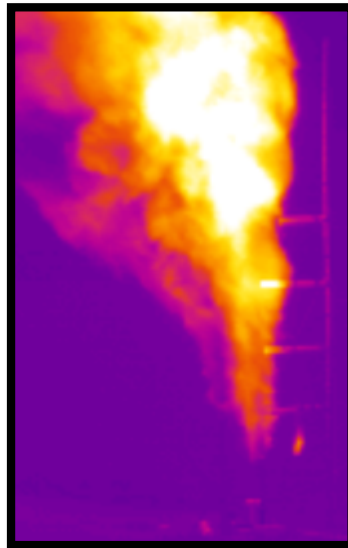


Figura 29: Imatge de la càmera infraroig utilitzada en la gravació del experiment JFP-06-008.

Les dues figures anteriors mostren les diferències que hi ha entre la interpretació de la influència del vent en FLACS i la influència real. D'altra banda, el vent mesurat per Gómez [1] va ser de 3,5 m/s, en aquest cas s'ha optat per dissenyar l'escenari amb un vent de 1,8 m/s. Quan s'introduïa un valor pròxim als 3,5 m/s, FLACS interpretava que tot el vent incidia de manera homogènia en l'eix axial de la flama, i mostrava una flama molt inclinada, com a conseqüència s'obtenien resultats molt baixos tant en temperatura com en radiació.

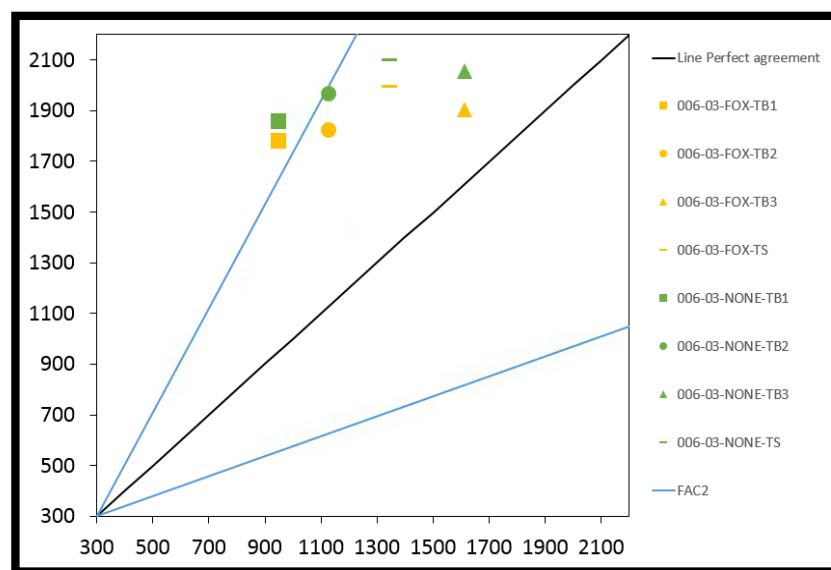
6.4. Simulació de l'experiment JFP-006-03

En l'experiment JFP-006-03 les condicions establertes han estat les següents:

Taula 25: Especificacions preses en l'experiment JFP-006-03. Diàmetre de sortida del doll en mm, la dimensió de la malla en m, el cabal del combustible en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$, la zona d'ignició en m^3 i el vent en m/s.

Variable	Especificació
Diàmetre de sortida del doll	30
Dimensió de la malla	0,1 uniforme
Cabal de combustible	0,32
Zona d'ignició	0,25x0,25x1
Model de combustió	EDC
Model de radiació	DTM
Model de sutge	FOX i "None"
Emissivitat	0,35
Vent	0

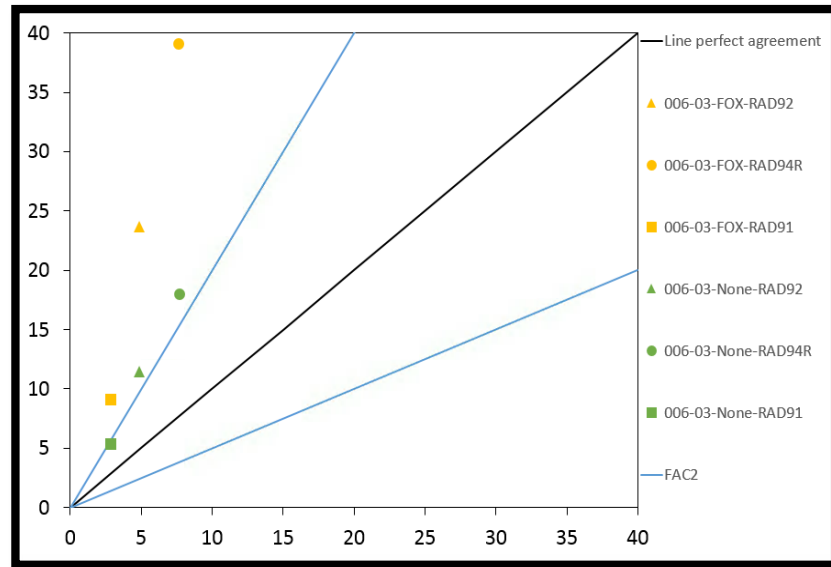
Tot seguit, es mostra la gràfica dels resultats dels sensors de temperatura. La nomenclatura utilitzada és la mateixa que en l'apartat anterior.



Gràfica 15: Estudi dels sensors de temperatura de l'experiment JFP-006-03. La temperatura està en K.

Tal i com s'ha mostrat en l'apartat anterior, els escenaris dissenyats amb model de sutge mostren uns valors més pròxims, en termes de temperatura, que els escenaris sense model de sutge. En aquest cas, tots els sensors mostren una aproximació semblant (pot ser degut al efecte del vent, en aquest cas el vent és inexistent). Cal destacar que els sensors amb pitjor aproximació (TB1 i TB2) són els més pròxims al fenomen del "lift-off", tal i com ja passava anteriorment.

A continuació es mostren els resultats dels sensors de radiació.



Gràfica 16: Estudi dels sensors de radiació de l'experiment JFP-006-03. La radiació està en KW/m^2 .

En concordança als resultats del experiment anterior (JFP-006-08), els escenaris que no tenen en compte el model de sutge mostren resultats més favorables pel que fa a la radiació. En els dos escenaris, destaca el sensor RAD94R (sensor més pròxim a la flama) per mostrar pitjors resultats en front als altres dos (RAD91 i RAD92). Novament, sembla ser que el programa approximi millor la radiació en funció de la distància a l'eix del fenomen de combustió. De la mateixa manera que en el cas anterior, la malla no pot tenir influència en els resultats degut a l'homogeneïtzació d'aquesta en la zona on resideixen tots els sensors (tant els de radiació com els de temperatura).

A continuació es procedeix a l'anàlisi dels resultats dels sensors de radiació i temperatura mitjançant el càlcul dels índexs FB i NMSE (equacions 24 i 25).

Taula 26: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-006-03 en la simulació amb model FOX.

SENSOR	FB	NMSE
TB1	0,46	0,25
TB2	0,95	<u>1,29</u>
TB3	0,65	<u>1,13</u>
TS	0,93	<u>1,21</u>
RAD92	1,32	<u>3,12</u>
RAD94R	1,38	<u>2,88</u>
RAD91	1,08	<u>1,58</u>

Taula 27: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-006-03 en la simulació sense model de sutge.

SENSOR	FB	NMSE
TB1	0,51	0,30
TB2	1,00	<u>1,50</u>
TB3	0,71	<u>1,31</u>
TS	0,97	<u>1,35</u>
RAD92	0,82	<u>0,81</u>
RAD94R	0,82	0,64
RAD91	0,65	0,44

Degut a la similitud dels experiments JPF-006-08 i JFP-006-63 i els seus resultats, l'anàlisi dels índexs és semblant al del cas anterior. En el cas del escenari amb model FOX, la majoria dels resultats semblen interpretar-se (NMSE) com a no sistemàtics (>1), en aquest cas, el sensor TS mostra resultats amb concordança als altres, degut a la no implementació de vent en les simulacions.

En l'escenari sense model de sutge, els resultats de radiació es mostren sistemàtics en tots els casos, destacant com la pitjor aproximació el sensor RAD92. L'índex no concorda amb els resultats mostrats en la gràfica anterior. És possible que el càlcul del índex s'hagi vist mermat degut als pocs valors donats. D'altra banda, els sensors de temperatura es mostren no sistemàtics (amb excepció del sensor TB1).

A continuació, es mostren imatges del post processat en FLACS (2D i 3D) i una imatge del experiment real de Gómez [1].

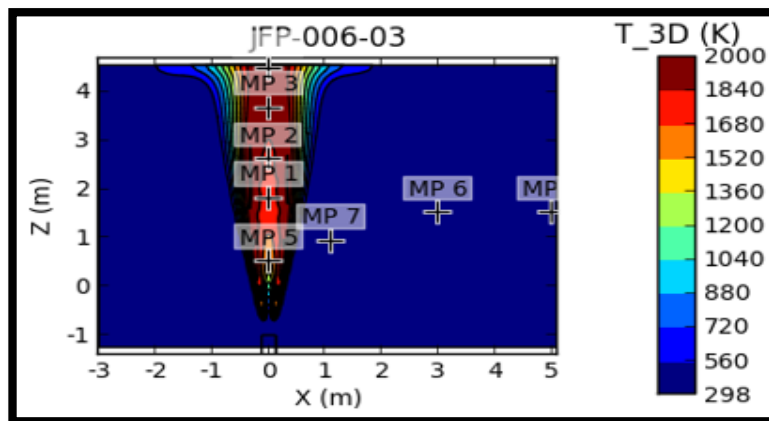


Figura 30: Il·lustració 2D del perfil de temperatures del experiment JFP-006-03.

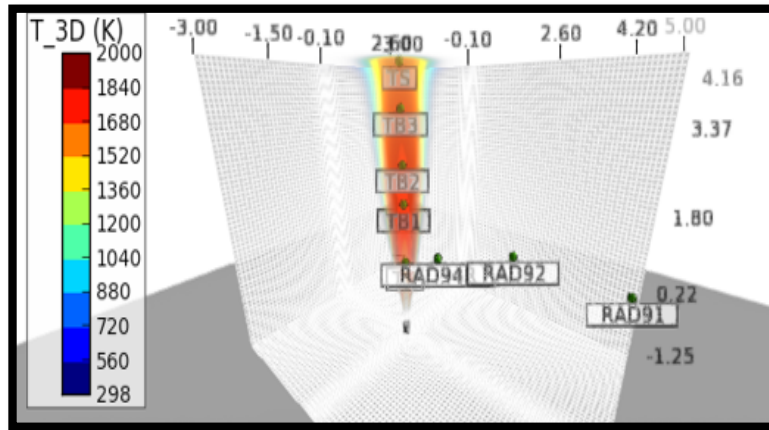


Figura 31: Il·lustració 3D del perfil de temperatures del experiment JFP-006-03.

En aquest cas, destaca que el vent implementat ha sigut nul, per això l'eix de la flama es manté uniforme.

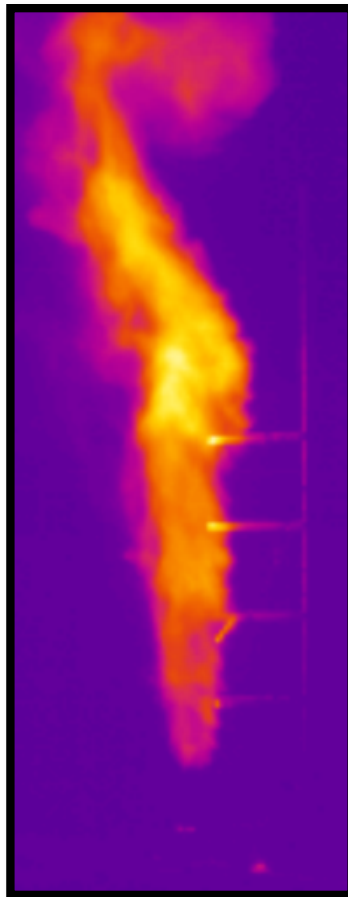


Figura 32: Imatge de la càmera infraroig utilitzada en la gravació del experiment JFP-06-003

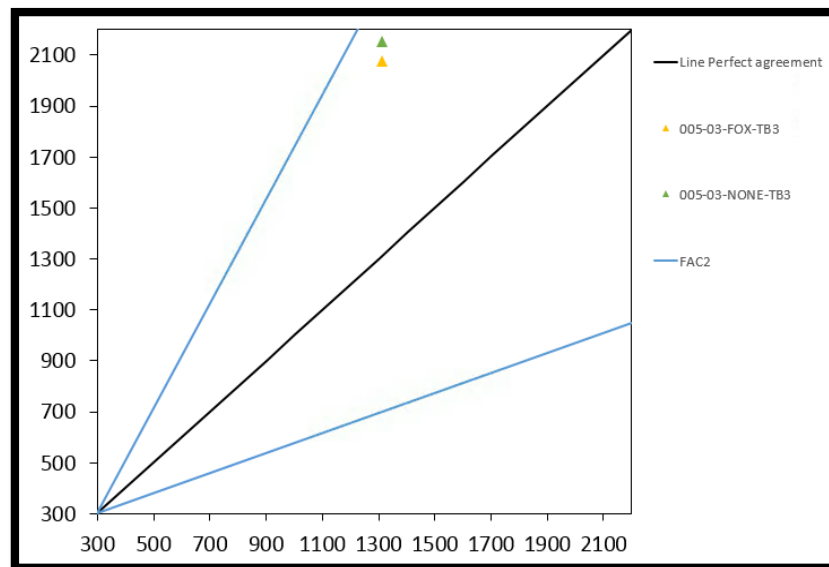
6.5. Simulació de l'experiment JFP-005-03

En l'experiment JFP-005-03 les condicions establertes han estat les següents:

Taula 28: Especificacions preses en l'experiment JFP-005-03. Diàmetre de sortida del doll en mm, la dimensió de la malla en m, el cabal del combustible en $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$, la zona d'ignició en m^3 i el vent en m/s.

Variable	Especificació
Diàmetre de sortida del doll	25,3
Dimensió de la malla	0,1 uniforme
Cabal de combustible	0,32
Zona d'ignició	0,25x0,25x1
Model de combustió	EDC
Model de radiació	DTM
Model de sutge	FOX i "None"
Emissivitat	0,35
Vent	0

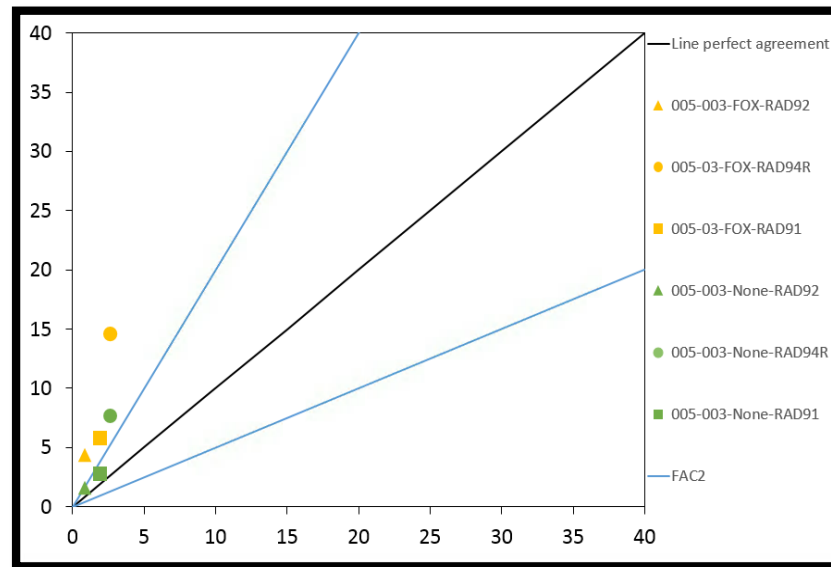
A continuació, es mostra el resultat del sensor de temperatura per l'anàlisi del experiment JFP-005-03. En aquest cas s'ha estudiat només el sensor TB3, degut a la inexistència dels altres dos en els experiments. La nomenclatura utilitzada és la mateixa que en els apartats anteriors.



Gràfica 17: Estudi dels sensors de temperatura de l'experiment JFP-005-03. La temperatura està en K.

La gràfica mostra la mateixa tendència que ens els experiments anteriors, en termes de temperatura, l'escenari amb model de sutge té millor aproximació al escenari sense model de sutge.

A continuació, es mostren els resultats dels sensors de radiació.



Gràfica 18: Estudi dels sensors de radiació de l'experiment JFP-005-03. La radiació està en KW/m^2 .

Pel que fa als resultats dels sensors de radiació, es pot apreciar com aquests mostren una aproximació a la resposta millor que en els estudis anteriors. En concordança amb resultats anteriors, l'escenari on s'implementa el model de sutge (FOX) mostra una pitjor aproximació en vers a l'escenari sense model de sutge. En aquest cas, també destaca el sensor RAD94R (més pròxim a l'eix de la flama) per mostrar uns resultats més desfavorables envers els experiments anteriors. Per tant, és evident que després de mostrar el mateix comportament en diversos experiments, es pot afirmar que el programa aproxima millor el càlcul de la radiació amb la distància a l'eix de la flama (RAD91 i RAD92 han mostrat millors resultat que el RAD94R).

A continuació, es procedeix a l'anàlisi dels índexs estadístics FB i NMSE.

Taula 29: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-005-03 en la simulació amb model FOX.

SENSOR	FB	NMSE
TB3	0,49	<u>0,25</u>
RAD92	1,18	<u>6,54</u>
RAD94R	1,39	<u>3,23</u>
RAD91	0,99	<u>1,23</u>

Taula 30: Estudi dels índexs FB i NMSE dels sensors de temperatura i radiació de l'experiment JFP-005-03 en la simulació sense model de sutge.

SENSOR	FB	NMSE
TB3	0,55	<u>0,32</u>
RAD92	0,77	0,65
RAD94R	0,96	0,77
RAD91	0,39	0,14

El resultat del sensor de temperatura (TB3) es mostra sistemàtic en els dos escenaris, destaquen els índexs amb model FOX per mostrar millor aproximació a la realitat (d'igual manera que en el gràfic).

En el cas dels sensors de radiació, els resultats mostren una coherència general, seguint amb el patró descrit de l'aproximació de la resposta en funció de la distància al eix de flama (RAD91>RAD92>RAD94R). Es mostra una excepció (model FOX), en els resultats del índex NMSE en els sensors RAD94R i RAD92. Tal i com ja passava en l'experiment anterior, es possible que l'índex no approximi adequadament degut als pocs valors donats. En termes generals, els índexs tornen a mostrar que els sensors de radiació sense model de sutge aproxima millor a la resposta que els sensors amb model FOX.

A continuació, es mostren les imatges del post processat en FLACS (2D i 3D) del perfil de temperatures i una imatge del experiment realitzat per l'autora Gómez [1].

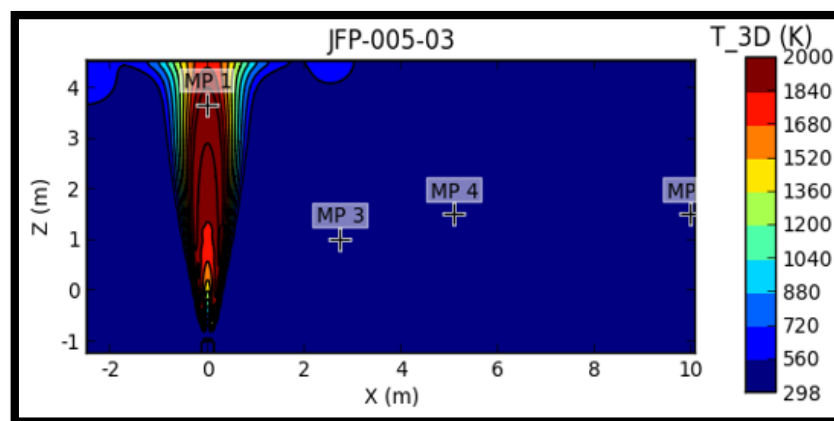


Figura 33: Il·lustració 2D del perfil de temperatures del experiment JFP-005-03.

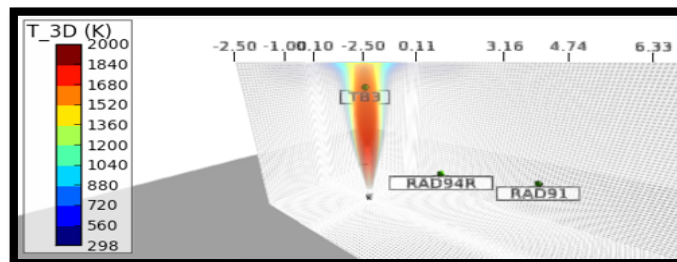


Figura 34: Il·lustració 3D del perfil de temperatures del experiment JFP-005-03.

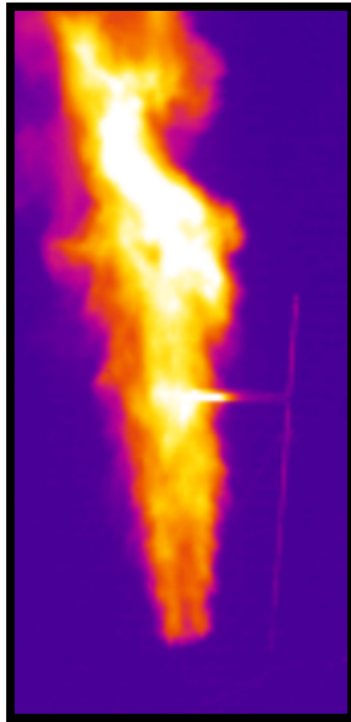


Figura 35: Imatge de la càmera infraroig utilitzada en la gravació del experiment JFP-05-003.

Es destacable, com una vegades més, el simulador FLACS fa una bona aproximació del fenomen de doll de foc quan la dimensió de la malla és l'adequada. En aquest cas, no es va mesurar la velocitat del vent, semblar ser que el vent no mostrava una alta rellevància en el fenomen.

7. CONCLUSIONS

En el present capítol es plantejaran les conclusions més destacables del treball, així doncs es llisten a continuació:

- 1- Els experiments de Gómez [1] es van realitzar sense mesurar diverses variables que poden influir en els resultats de les simulacions posteriors, és a dir, és important destacar si en el moment de l'experiment hi ha vent, la direcció provinent del mateix i el cabal mesurat (o calculat a posteriori).
- 2- El simulador FLACS és incapaç de simular el vent de forma no homogènia. És a dir, els experiments realitzats per Gómez [1] (els que hi havia vent) es podia apreciar com el vent no afectava a la flama de forma constant en tots els seus punts. Per tant, seria bo poder implementar el vent en FLACS de forma variable en l'eix de la flama.
- 3- El simulador FLACS planteja diverses limitacions a l'hora de computar les simulacions. FLACS treballa amb un "core" per cada simulació, això genera que un ordinador amb 32 "cores" no pugui fer córrer cada simulació amb la màxima potència.
- 4- Les limitacions de temps i recursos han fet impossible l'estudi de tots els experiments realitzats per Gómez [1].
- 5- Les malles dissenyades amb una grandària de 0,2 metres plantegen una representació geomètrica del fenomen errònia. Aquestes simulacions semblen plantejar una combustió de torxa en vers una combustió de doll de foc.
- 6- Les simulacions amb una grandària de malla de 0,05 metres, donen una aproximació semblant en temperatura però molt desfavorable en els sensors de radiació.
- 7- Les simulacions amb un cabal menor de $0,1 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$ i una malla de 0,1 metres, destaquen per mostrar una forma geomètrica semblant a les torxes. És possible, que amb una malla més petita el programa pogués representar un doll.
- 8- Els models de combustió EDC i MIB plantegen resultats similars en termes de temperatura, però en el cas de la radiació, el model MIB és clarament ineficaç (valors totalment sobreestimats).
- 9- Els models de radiació DTM i "Six-flux" plantegen resultats semblants en termes de temperatura. D'altra banda, el model "Six-flux" no es capaç de representar la radiació donant valors nuls.
- 10- Els experiments realitzats per obtenir resultats coherents en la implementació del model de sutge han generat controvèrsia. Els models FOX i FCF, plantegen resultats semblants (tant en temperatura com en radiació) però diferències significatives en radiació respecte a les simulacions sense model de sutge. El model FCF, necessita una estudi més ampli degut a que és necessari que l'usuari introdueixi el percentatge de carboni convertit en sutge. Finalment, els resultats de radiació tendeixen a insinuar que la formació de sutge en els experiments va ser realment baixa.

El simulador dona resultats prometedors en radiació en les simulacions on el model de sutge és inexistent, per tant, quan s'implementa sutge els resultats obtinguts són sobreestimats.

11- Els resultats de temperatura i radiació són insensibles a canvis d'emissivitat.

12- Els experiments que mostraven un diàmetre de fuita més elevat (JFP-006-08 i JFP-006-03) mostraven resultats de temperatura lleugerament superiors al experiment amb diàmetre inferior (JFP-005-03). D'altra banda, l'experiment amb diàmetre inferior va mostrar millors resultats en relació a la radiació. També s'ha de destacar, que l'experiment JFP-006-03 presentava uns valors en vers la radiació força bons.

13- Al llarg de l'estudi dels tres experiments esmentats, s'ha de destacar l'aproximació en els resultats dels sensors de temperatura quan s'augmentava la distància vertical (millors resultats en els sensors més allunyats del efecte "*lift-off*"). També mereix especial menció l'efecte del simulador a l'hora d'aproximar millor els resultats dels sensors de radiació en vers la distància radial al eix de la flama (millors resultats en els sensors més allunyats de l'eix de la flama).

Finalment, cal destacar els següents punts que s'haurien de dur a terme per continuar validant el simulador FLACS-fire en dolls de foc.

1- Cal un ampli estudi respecte el model de formació de sutge FCF. És necessari plantejar la possibilitat d'augmentar el percentatge de carboni que es converteix en sutge. El present treball s'ha vist limitat per temps i recursos per estudiar aquesta possibilitat. Si més no, s'entén que el percentatge de sutge que s'hauria d'introduït resideix en valors pròxims al 1%, degut als resultats mostrats en [6.2.3. Sutge](#)).

2- Cal treballar amb el model "*Jet Utility Program*" per validar els experiments restants que destaquen per mostrar una velocitat de sortida sònica.

3- És necessari que als experiments en els quals s'hagi mesurat el vent, s'efectuï un ampli estudi per tal de verificar la velocitat del vent més adequada per cada cas.

4- Un estudi de grandària de malla per cada cas concret, és a dir, el diàmetre de la fuita ha de ser proporcional a la grandària de la malla. D'aquesta manera, el programa podrà efectuar la simulació més rigorosament.

5- És necessària la validació de les altures de flama mesurades per Gómez [1], mitjançant una altura del domini molt més gran.

8. REFERÈNCIES

- [1] M. Gómez Mares, “Estudio Experimental Y Modelización Matemática,” 2009.
- [2] N. Pedersen, “Modeling of jet and pool fires and validation of the fire model in the CFD code FLACS,” no. June, 2012.
- [3] A. Palacios, “Study of Jet Fires Geometry and Radiative Features,” 2011.
- [4] A. Palacios, M. Muñoz, and J. Casal, “Jet Fires: An Experimental Study of the Main Geometrical Features of the Flame in Subsonic and Sonic Regimes,” *Wiley Intersci.*, vol. 7, no. PART 1, pp. 405–410, 2009.
- [5] J. Casal, “Jet fires: A ‘minor’ fire hazard joaquim casal,” *Chem. Eng. Trans.*, vol. 26, pp. 13–20, 2012.
- [6] D. Kuzmin, “Introduction to Computational Fluid Dynamics,” in *AIAA Journal*, 2006, vol. 44, no. 2, pp. 193–193.
- [7] P. Bradshaw, “Turbulence, the chief outstanding difficulty of our subject.” 1994.
- [8] D. P. Launder, B. E. & Spalding, “The numerical computation of turbulent flows.” 1974.
- [9] B. H. Hjertager, “Simulation of transient compressible turbulent reactive flows, Combustion.” 1982.
- [10] Gexcon AS, “FLACS v10.4 User’s Manual,” p. 491, 2015.
- [11] L. Wang, “Detailed Chemistry, Soot, and Radiation Calculations In Turbulent Reacting Flows,” no. May, p. 210, 2004.
- [12] I. M. Kennedy, “Models of soot formation and oxidation.” 1997.
- [13] C. Lautenberger, “CFD Simulation of Soot Formation and Flame Radiation,” *Master Thesis*, 2002.
- [14] J. Osenbroch, *Aalborg Universitet CFD study of gas dispersion and jet fires in complex geometries to The Faculty of Engineering and Science , Aalborg University*. 2006.
- [15] A. Johnson, “A model for predicting the thermal radiation hazards from large-scale horizontally released natural gas jet fires.” 1994.
- [16] J. Steckler, “Flow induced by fire in a compartment: 106.” 1982.

- [17] C. Gutiérrez-Montes, “Experimental data and numerical modelling of 1.3 and 2.3 MW fires in a 20 m cubic atrium.” 2009.
- [18] J. Casal, “Análisis del riesgo en instalaciones industriales,” 1999.
- [19] M. Gómez-Mares, M. Muñoz, and J. Casal, “Radiant heat from propane jet fires,” *Exp. Therm. Fluid Sci.*, vol. 34, no. 3, pp. 323–329, 2010.
- [20] B. F. Magnussen, “The Eddy Dissipation Concept- A Bridge Between Science and Technology,” *ECCOMAS Themat. Conf. Comput. Combust.*, pp. 21–24, 2005.
- [21] J. R. Siegel, R. & Howell, “Thermal radiation heat transfer, Taylor and Francis-Hemisphere.” 2001.
- [22] F. Rigas and S. Sklavounos, “Simulation of Coyote series trials - Part II: A computational approach to ignition and combustion of flammable vapor clouds,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 61, no. 5, pp. 1444–1452, 2005.

9. ANNEX

L'annex del present treball exposarà; les equacions per al càlcul dels índex estadístics i els resultats del cabal i pressió de tots els experiments realitzats per l'autora Gómez.

Les variables del càlcul del cabal són les següents: temps (en segons), condició en cada moment (subsònic o sònic), ΔP diferencial de pressió entre la pressió atmosfèrica i la pressió interna (en bars), $P_{\text{continguda}}$ pressió absoluta en l'interior (en bars), Ψ l'índex de condició subsònica o sònica, $m(\text{subsònic})$ el cabal subsònic en cada instant (en $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$), $m(\text{sònic})$ el cabal sònic en cada instant (en $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$) i $m(\text{mix})$ el cabal resultant en cada instant (en $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$).

Les equacions per al càlcul dels índexs estadístics són les següents:

Mètode estadístic	Referència	Equació
Fractional bias (FB)	[22]	$\text{FB} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 2 \frac{\bar{y}_m - \bar{y}_e}{\bar{y}_m + \bar{y}_e}$
Normalized mean square error (NMSE)	[22]	$\text{NMSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(y_m^i - y_e^i)^2}{\bar{y}_m \bar{y}_e}$

EXPERIMENT JFP-006-08

Temps [s]	Condicció	APcont(bar)	Pcont(bar)	Ψ	$\Psi=1$	m (subsònic)	m (sònic)	m (mix)
0,00	Subsònic	0,01	1,02	0,22	0,00	0,09	0,41	0,09
0,50	Subsònic	0,59	1,61	0,98	0,00	0,62	0,65	0,62
1,00	Subsònic	0,59	1,61	0,98	0,00	0,62	0,65	0,62
1,50	Subsònic	0,59	1,61	0,98	0,00	0,62	0,65	0,62
2,00	Subsònic	0,37	1,38	0,92	0,00	0,50	0,56	0,50
2,50	Subsònic	0,37	1,38	0,92	0,00	0,50	0,56	0,50
3,00	Subsònic	0,37	1,38	0,92	0,00	0,50	0,56	0,50
3,50	Subsònic	0,38	1,39	0,93	0,00	0,51	0,56	0,51
4,00	Subsònic	0,38	1,39	0,93	0,00	0,51	0,56	0,51
4,50	Subsònic	0,38	1,39	0,93	0,00	0,51	0,56	0,51
5,00	Subsònic	0,53	1,54	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
5,50	Subsònic	0,53	1,54	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
6,00	Subsònic	0,53	1,54	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
6,50	Subsònic	0,55	1,57	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
7,00	Subsònic	0,55	1,57	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
7,50	Subsònic	0,55	1,57	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
8,00	Subsònic	0,55	1,56	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
8,50	Subsònic	0,55	1,56	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
9,00	Subsònic	0,55	1,56	0,98	0,00	0,60	0,63	0,60
9,50	Subsònic	0,52	1,53	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
10,00	Subsònic	0,52	1,53	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
10,50	Subsònic	0,52	1,53	0,97	0,00	0,59	0,62	0,59
11,00	Subsònic	0,29	1,31	0,88	0,00	0,46	0,53	0,46
11,50	Subsònic	0,29	1,31	0,88	0,00	0,46	0,53	0,46
12,00	Subsònic	0,29	1,31	0,88	0,00	0,46	0,53	0,46
12,50	Subsònic	0,10	1,11	0,62	0,00	0,27	0,45	0,27
13,00	Subsònic	0,10	1,11	0,62	0,00	0,27	0,45	0,27
13,50	Subsònic	0,10	1,11	0,62	0,00	0,27	0,45	0,27
14,00	Subsònic	0,01	1,03	0,25	0,00	0,10	0,41	0,10
14,50	Subsònic	0,01	1,03	0,25	0,00	0,10	0,41	0,10
15,00	Subsònic	0,01	1,03	0,25	0,00	0,10	0,41	0,10
Promig	Subsònic	-	1,39	-	-	0,47	0,56	0,47

EXPERIMENT JFP-006-03

Temps [s]	Condicció	APcont(bar)	Pcont(bar)	Ψ	$\Psi=1$	m (subsònic)	m (sònic)	m (mix)
0,00	Subsònic	0,37	1,38	0,93	0,00	0,52	0,56	0,52
0,50	Subsònic	0,37	1,38	0,93	0,00	0,52	0,56	0,52
1,00	Subsònic	0,37	1,38	0,93	0,00	0,52	0,56	0,52
1,50	Subsònic	0,67	1,68	0,99	0,00	0,67	0,68	0,67
2,00	Subsònic	0,67	1,68	0,99	0,00	0,67	0,68	0,67
2,50	Subsònic	0,67	1,68	0,99	0,00	0,67	0,68	0,67
3,00	Subsònic	0,71	1,72	0,99	0,00	0,69	0,69	0,69
3,50	Subsònic	0,71	1,72	0,99	0,00	0,69	0,69	0,69
4,00	Subsònic	0,71	1,72	0,99	0,00	0,69	0,69	0,69
4,50	Sònic	0,87	1,89	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
5,00	Sònic	0,87	1,89	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
5,50	Sònic	0,87	1,89	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
6,00	Sònic	0,87	1,88	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
6,50	Sònic	0,87	1,88	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
7,00	Sònic	0,87	1,88	0,98	1,00	0,75	0,76	0,76
7,50	Subsònic	0,41	1,42	0,94	0,00	0,54	0,57	0,54
8,00	Subsònic	0,41	1,42	0,94	0,00	0,54	0,57	0,54
8,50	Subsònic	0,41	1,42	0,94	0,00	0,54	0,57	0,54
9,00	Subsònic	0,22	1,24	0,82	0,00	0,41	0,50	0,41
9,50	Subsònic	0,22	1,24	0,82	0,00	0,41	0,50	0,41
10,00	Subsònic	0,22	1,24	0,82	0,00	0,41	0,50	0,41
10,50	Subsònic	0,08	1,10	0,58	0,00	0,26	0,44	0,26
11,00	Subsònic	0,08	1,10	0,58	0,00	0,26	0,44	0,26
11,50	Subsònic	0,08	1,10	0,58	0,00	0,26	0,44	0,26
Promig	Subsònic	-	1,54	-	-	0,57	0,62	0,58

EXPERIMENT JFP-005-03

Temps [s]	Condicció	APcont(bar)	Pcont(bar)	Y	Y=1	m (subsònic)	m (sònic)	m (mix)
0,00	Subsònic	0,57	1,59	0,98	0,00	0,63	0,64	0,63
0,50	Subsònic	0,57	1,59	0,98	0,00	0,63	0,64	0,63
1,00	Sònic	1,17	2,18	0,96	1,00	0,84	0,88	0,88
1,50	Sònic	1,17	2,18	0,96	1,00	0,84	0,88	0,88
2,00	Sònic	1,17	2,18	0,96	1,00	0,84	0,88	0,88
2,50	Sònic	1,54	2,55	0,91	1,00	0,94	1,03	1,03
3,00	Sònic	1,54	2,55	0,91	1,00	0,94	1,03	1,03
3,50	Sònic	1,54	2,55	0,91	1,00	0,94	1,03	1,03
4,00	Sònic	1,43	2,44	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
4,50	Sònic	1,43	2,44	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
5,00	Sònic	1,43	2,44	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
5,50	Sònic	1,36	2,38	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
6,00	Sònic	1,36	2,38	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
6,50	Sònic	1,36	2,38	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
7,00	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
7,50	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
8,00	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
8,50	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
9,00	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
9,50	Sònic	1,36	2,37	0,93	1,00	0,89	0,96	0,96
10,00	Sònic	1,39	2,40	0,93	1,00	0,90	0,97	0,97
10,50	Sònic	1,39	2,40	0,93	1,00	0,90	0,97	0,97
11,00	Sònic	1,39	2,40	0,93	1,00	0,90	0,97	0,97
11,50	Sònic	1,41	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
12,00	Sònic	1,41	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
12,50	Sònic	1,41	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
13,00	Sònic	1,42	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
13,50	Sònic	1,42	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
14,00	Sònic	1,42	2,43	0,93	1,00	0,91	0,98	0,98
14,50	Sònic	1,42	2,44	0,92	1,00	0,91	0,98	0,98
15,00	Sònic	1,42	2,44	0,92	1,00	0,91	0,98	0,98

EXPERIMENT JFP-005-03

Temps [s]	Condicció	APcont(bar)	Pcont(bar)	Y	Y=1	m (subsònic)	m (sònic)	m (mix)
15,50	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
16,00	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
16,50	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
17,00	Sònic	1,48	2,49	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
17,50	Sònic	1,48	2,49	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
18,00	Sònic	1,48	2,49	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
18,50	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
19,00	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
19,50	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
20,00	Sònic	1,47	2,48	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
20,50	Sònic	1,47	2,48	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
21,00	Sònic	1,47	2,48	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
21,50	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
22,00	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
22,50	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
23,00	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
23,50	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
24,00	Sònic	1,46	2,47	0,92	1,00	0,92	1,00	1,00
24,50	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
25,00	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
25,50	Sònic	1,45	2,46	0,92	1,00	0,92	0,99	0,99
26,00	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
26,50	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
27,00	Sònic	1,44	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
27,50	Sònic	1,43	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
28,00	Sònic	1,43	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
28,50	Sònic	1,43	2,45	0,92	1,00	0,91	0,99	0,99
29,00	Sònic	1,37	2,38	0,93	1,00	0,90	0,96	0,96
29,50	Sònic	1,37	2,38	0,93	1,00	0,90	0,96	0,96
30,00	Sònic	1,37	2,38	0,93	1,00	0,90	0,96	0,96

EXPERIMENT JFP-005-03

Temps [s]	Condicció	APcont(bar)	Pcont(bar)	Y	Y=1	m (subsònic)	m (sònic)	m (mix)
30,50	Sònic	1,24	2,25	0,95	1,00	0,86	0,91	0,91
31,00	Sònic	1,24	2,25	0,95	1,00	0,86	0,91	0,91
31,50	Sònic	1,24	2,25	0,95	1,00	0,86	0,91	0,91
32,00	Sònic	1,08	2,09	0,97	1,00	0,82	0,84	0,84
32,50	Sònic	1,08	2,09	0,97	1,00	0,82	0,84	0,84
33,00	Sònic	1,08	2,09	0,97	1,00	0,82	0,84	0,84
33,50	Sònic	0,95	1,97	0,98	1,00	0,78	0,79	0,79
34,00	Sònic	0,95	1,97	0,98	1,00	0,78	0,79	0,79
34,50	Sònic	0,95	1,97	0,98	1,00	0,78	0,79	0,79
35,00	Sònic	0,83	1,84	0,99	1,00	0,73	0,74	0,74
35,50	Sònic	0,83	1,84	0,99	1,00	0,73	0,74	0,74
36,00	Sònic	0,83	1,84	0,99	1,00	0,73	0,74	0,74
36,50	Subsònic	0,69	1,70	0,99	0,00	0,68	0,69	0,68
37,00	Subsònic	0,69	1,70	0,99	0,00	0,68	0,69	0,68
37,50	Subsònic	0,69	1,70	0,99	0,00	0,68	0,69	0,68
38,00	Subsònic	0,52	1,53	0,97	0,00	0,60	0,62	0,60
38,50	Subsònic	0,52	1,53	0,97	0,00	0,60	0,62	0,60
39,00	Subsònic	0,36	1,37	0,92	0,00	0,51	0,56	0,51
39,50	Subsònic	0,36	1,37	0,92	0,00	0,51	0,56	0,51
40,00	Subsònic	0,36	1,37	0,92	0,00	0,51	0,56	0,51
40,50	Subsònic	0,18	1,19	0,77	0,00	0,37	0,48	0,37
41,00	Subsònic	0,18	1,19	0,77	0,00	0,37	0,48	0,37
41,50	Subsònic	0,18	1,19	0,77	0,00	0,37	0,48	0,37
42,00	Subsònic	0,03	1,04	0,35	0,00	0,15	0,42	0,15
42,50	Subsònic	0,03	1,04	0,35	0,00	0,15	0,42	0,15
43,00	Subsònic	0,03	1,04	0,35	0,00	0,15	0,42	0,15
Promig	Sònic	-	2,18	-	-	0,81	0,88	0,87